

В. Эбелинг, А. Фёрстер,
В. Фортов, В. Грязнов, А. Полищук

Теплофизические свойства горячей плотной плазмы



R&C
Dynamics



R&C
Dynamics

TEUBNER-TEXTE zur Physik — Band 25

Herausgeber/Editors: Werner Ebeling, Berlin
Wolfgang Meiling, Dresden
Armin Uhlmann, Leipzig
Bernd Wilhelmi, Jena

Werner Ebeling Andreas Förster
Vladimir E. Fortov Viktor K. Gryaznov
Aleksandr Ya. Polishchuk

Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas

B.G. Teubner Verlagsgesellschaft
Stuttgart Leipzig 1991

Редакторы:
Вернер Эбелинг, Берлинг
Вольфганг Мэйлинг, Дрезден
Армин Ульманн, Лепциг
Бернд Вильгельми, Иена

Вернер Эбелинг, Андреас Фёрстер, Владимир
Фортов, Виктор Грязнов, Александр Полищук

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГОРЯЧЕЙ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ

Перевод с английского
Ю. В. Колесниченко



Москва ♦ Ижевск

2007

УДК 533.9
ББК 22.333
Т 343

Интернет-магазин

MAIHESSIS

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- нефтегазовые технологии



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту №05-02-30033.

Эбелинг В., Фёрстер А., Фортвов В., Грязнов В., Полищук А.

Теплофизические свойства горячей плотной плазмы. — М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2007. — 400 с.

Предлагаемая книга посвящена плазме высокой плотности, где энергия взаимодействия частиц сопоставима с кинетической энергией их теплового движения. Основное внимание уделено методам вычисления термодинамических функций равновесных систем. Затронуты вопросы кинетических свойств неидеальной плазмы, а также проблемы, связанные с поглощением лазерного излучения и торможением пучков тяжелых ионов в плазме с сильным межчастичным взаимодействием. Обсуждаются теоретические методы и модели для описания плотной плазмы, приводится сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

ISBN 978-5-93972-646-7

ББК 22.333

© В. Эбелинг, А. Фёрстер, В. Фортвов, В. Грязнов, А. Полищук, 2007

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2007

<http://shop.rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

Оглавление

Предисловие к русскому изданию	8
ГЛАВА 1. Предисловие	10
ГЛАВА 2. Физические свойства горячей плотной плазмы	12
2.1. Задача термодинамического описания горячей сжатой плазмы	12
2.2. Исторические сведения	17
2.3. Безразмерные параметры плазмы	19
ГЛАВА 3. Общая термодинамика и кинетика переходов	25
3.1. Обзор статистико-термодинамических результатов	25
3.2. Разложение при низких плотностях	39
3.3. Аппроксимации Якоби–Паде	43
3.4. Средне-сферическое приближение	50
3.5. Сдвиги энергетических уровней и ионизационная щель	53
3.6. Кинетика процессов ионизации и переходов между уровнями	61
ГЛАВА 4. Термодинамические и кинетические свойства простой плазмы	73
4.1. Термодинамические соотношения	73
4.2. Термодинамика водорода	79
4.3. Термодинамика гелия и водородно-гелиевых смесей	86
4.4. Термодинамика плазмы других инертных газов	98
4.5. Сравнение химической модели и модели среднего атома	108
4.6. Сдвиги энергетических уровней и спектральных линий для водородоподобных связанных состояний	115
4.7. Кинетика ионизации водородоподобной плазмы	120
4.8. Фронты ионизации и явления нуклеации	126
4.9. Термодинамика необратимых процессов ионизации	138

ГЛАВА 5 Уравнение состояния и состав многокомпонентных систем	145
5 1 Методы расчета состава и термодинамических свойств многокомпонентных систем	145
5 2 Модель ограниченного атома	164
5 3 Некоторые результаты и их обсуждение	169
ГЛАВА 6 Ионизационное равновесие и неравновесные свойства металлической плазмы	178
6 1 Общий подход и модель Томаса–Ферми	178
6 2 Приближенные расчеты спектров электронов в модели ограниченного атома	195
6 3 Модели, описывающие явление перехода диэлектрик–металл	198
6 4 Обобщенная химическая модель	205
6 5 Полуэмпирический расчет электронных коэффициентов переноса	213
ГЛАВА 7 Поглощение лазерного излучения и торможение ионных пучков в плазме	228
7 1 Тормозное излучение и динамическая проводимость	228
7 2 Теоретический подход к расчету непрозрачностей в плазме	243
7 3 Непрозрачности плазмы Полуэмпирический подход	246
7 4 Теория пробегов быстрых ионов в плазме металлов	254
7 5 Полуэмпирическая модель тормозной способности плазмы	258
ГЛАВА 8 Уравнение состояния плотной водородной плазмы и плазмы инертных газов	268
8 1 Термодинамические свойства и энергетические уровни плотного водорода	268
8 2 Уравнение состояния при высокой плотности на основе подхода с зависящими от плотности энергетическими уровнями	281
8 3 Уравнение состояния при высокой плотности на основе метода исключенного объема	292
8 4 Переходы за счет давления, изоэнтропы и ударные адиабаты для плотного водорода и дейтерия	297
8 5 Термодинамика ударно-сжатых газов мегабарного диапазона давлений в рамках модели SAHA	308
8 5 1 Термодинамическая модель Эффекты электронного вырождения и межчастичного взаимодействия	309
8 5 2 Короткодействующее отгалкивание	311

8.5.3. Термодинамика ударно-сжатых инертных газов. Расчет ударных адиабат и сравнение с экспериментом . . .	314
8.5.4. Термодинамика ударно-сжатого водорода (дейтерия) . . .	320
ГЛАВА 9. Термодинамика ударно-сжатых пористых металлов . . .	326
9.1. Термодинамическая модель. Эффекты вырождения электронов и взаимодействия частиц	329
9.1.1. Короткодйствующее отталкивание атомов и ионов	332
9.1.2. Дополнительное притяжение	334
9.2. Сравнение экспериментальных и расчетных данных	335
ГЛАВА 10. Таблицы термодинамических свойств	342
10.1. Алюминий (Al)	343
10.2. Железо (Fe)	348
10.3. Медь (Cu)	353
10.4. Золото (Au)	358
10.5. Свинец (Pb)	363
10.6. Висмут (Bi)	368
10.7. Уран (U)	371
ГЛАВА 11. Ссылки	376
Предметный указатель	397

Предисловие к русскому изданию

Физические свойства сжатого и разогретого вещества, находящегося в ионизированном — плазменном состоянии всегда представлял большой интерес с принципиальной и прикладной точек зрения. Плотная горячая плазма является наиболее распространенным состоянием вещества во Вселенной — на ее долю приходится более 95% видимой нами материи, находящейся в звездах, планетах и экзопланетах.

Исторически быстрое развитие физики плотной плазмы неразрывно связано с вхождением нашей цивилизации в атомную и космическую эры. Так в импульсных ядерных устройствах сжатое вещество используется для инициирования цепных ядерных реакций, а в термоядерных зарядах и в микромишенях управляемого термоядерного синтеза плазма при высоких концентрациях энергии — необходимое состояние топлива, в котором инициируются термоядерные реакции. Иным примером практического применения плотной плазмы могут служить явления вблизи электродов в дугах, мощные импульсные разряды и, плазма, создаваемая за фронтом ударных волн, лазерами или мощными пучками заряженных частиц. Сейчас такая плазма начинает играть все более важную во многих областях современной техники, как-то: дуговые лампы высокого давления, лазеры на плотной плазме, рентгеновские лазеры, установки термоядерного синтеза, газофазные ядерные реакторы, плазмо-химические устройства, космические аппараты, входящие в атмосферы планет, и т.п. Многие вопросы, связанные с проектированием, созданием, функционированием и оптимизацией этих устройств, требуют надежных сведений о теплофизических свойствах плазмы высокой плотности.

Теоретическое описание теплофизических свойств плазмы требует корректного учета сильного коллективного межчастичного взаимодействия, эффектов вырождения, правильного разделения и описания дискретного и непрерывного энергетических спектров, эффектов термической и плотностной ионизации и других сложных явлений в сжатой и разогретой химически реагирующей многокомпонентной среде. Эти явления определяют поведение вещества в обширной части фазовой диаграммы, занимая область от твердого тела и жидкости до нейтрального газа, покрывая фа-

зовые границы плавления и кипения металлов, а также область перехода металл-диэлектрик. Последняя проблема сейчас получила значительное развитие в экспериментах по многократному (квазиизотропическому) ударно-волновому сжатию диэлектриков и их металлизации в мегабарном диапазоне давлений, по электровзрыву проводников импульсным током, а также по диэлектризации сильносжатых металлов.

Сегодня изучение сильносжатых кулоновских систем является одной из наиболее «горячих» и интенсивно развивающихся фундаментальных научных дисциплин, находящейся на стыке физики плазмы, конденсированного состояния, атомной и молекулярной физики с большим разнообразием стимулированных неидеальностью физических эффектов и постоянно расширяющимся набором объектов и состояний, где эта неидеальность играет определяющую роль.

В этой книге авторами сделана попытка систематизировать, обобщить и изложить с единой точки зрения теоретический и экспериментальный материал, относящийся к этой новой области науки. Мы старались обсудить здесь возможно более широкий круг вопросов, где неидеальность проявляется наиболее рельефно именно в плазменном состоянии.

Нашей целью было сблизить фундаментальную теорию плазмы, основанную на строгих методах квантовой механики, современной статической физики и практических вычислительных методах, которыми пользуются специалисты-практики. При этом, мы старались привлекать существующий экспериментальный материал для проверки сделанных приближений и используемых моделей.

Ясно, что из-за исключительно быстрого развития физики плотной плазмы, затронутый в книге материал будет постоянно расширяться и уточняться. Мы будем благодарны читателям, которые пришлют критические замечания и пожелания. Для того, чтобы учесть последние работы, авторы ввели некоторые дополнения к первоначальному тексту (добавлены главы 8 и 9).

Надеемся, что книга окажется полезной для широкого круга специалистов, открывая им доступ к оригинальным работам и позволяя ориентироваться в увлекательных проблемах плотной горячей плазмы. Для чтения книги достаточно знания стандартных общепринятых курсов физического профиля.

Берлин, Черноголовка, Москва
Декабрь 2007 г.

Авторы

ГЛАВА 1

Предисловие

Более девяноста процентов материи во Вселенной и, особенно, звезды и планеты, находятся, главным образом, в состоянии плотной плазмы. Следовательно, изучение теплофизических свойств плотной плазмы имеет первостепенную важность для понимания эволюции и основных особенностей астрофизических объектов. В качестве примера можно привести интересные результаты по строению планет-гигантов Юпитера, Сатурна, Урана и Нептуна, полученные из наблюдений космического исследовательского аппарата «Вояджер-2». На Земле плотная плазма встречается достаточно редко; ее примерами могут служить явления вблизи электродов в дугах, импульсные мощные разряды и, плазма, созданная за фронтом ударных волн, лазерами или мощными пучками частиц. Сейчас такая плазма начинает играть все более важную роль во многих областях современной техники, как-то: дуговые лампы высокого давления, лазеры на плотной плазме, рентгеновские лазеры, установки термоядерного синтеза, газозфазные ядерные реакторы, плазм-химические устройства, твердые тела при высоком давлении, космические аппараты, входящие в атмосферу, и т. п. Многие вопросы, связанные с функционированием и оптимизацией этих устройств, требуют хорошего знания теплофизических свойств плотной плазмы.

На данном этапе развития фундаментальную теорию, основанную на квантовой механике и статистический физике, и практические вычислительные методы, которыми пользуются специалисты по плазме, все еще разделяет громадная пропасть. Зная об этом, авторы данной книги несколько лет назад объединили свои усилия, создав общий исследовательский проект, целью которого стало построение моста между теорией и практикой. Первым результатом этих совместных усилий стала работа по транспортным свойствам плазмы (EBELING et al., 1983, 1984). Здесь мы представляем книгу, посвященную теплофизическим свойствам плазмы, и уже можем заявить о других томах из серии «TEUBNER — TEXTE zur Physik», посвященных кинетическим и транспортным свойствам неидеальной плазмы, которые сейчас находятся на стадии подготовки.

Авторы выражают искреннюю благодарность многим коллегам, которые занимались как развитием данной теории, так и вычислениями или принимали участие в дискуссиях. Особенно нам хотелось бы отметить М. Бонитца, К. Килиманна, В.-Д. Крефта, Д. Кремпа, Р. Редмера, Г. Рёпке и М. Шлангеса из университетов Ростока и Грейфсвальда, Г. Лемана и П. Лейке из Берлинского университета им. Гумбольдта, Г. Хесса и Т. Кальбаума из Центрального института физики электронов в Берлине, К. Гюнтера из Вертинского OSRAM GmbH, Ю. Мейер-тер-Вена и А. Рикерта из Института квантовой оптики им. Макса Планка в Гархинге, Ю. Л. Климонтовича из Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, И. Л. Иосилевского из Московского физико-технического института, Е. П. Велихова из Института атомной энергии им. И. В. Курчатова, И. М. Беспалова, Л. М. Бибермана, А. Е. Шейндлина и И. Т. Якубова из Института высоких температур.

Отдельное спасибо госпоже Д. Розенгартен за набор рукописи и нескончаемое терпение. Мы также благодарны госпоже Н. С. Гуцевой за помощь в подготовке рукописи.

Берлин, Черноголовка, Москва
Сентябрь 1990 г.

Авторы

ГЛАВА 2

Физические свойства горячей плотной плазмы

2.1. Задача термодинамического описания горячей сжатой плазмы

Качественный анализ и количественное описание физических явлений, вызванных высокой локальной концентрацией энергии, основываются на термодинамических уравнениях состояния и отношениях, выражающих состав плазмы; последние нужны для вычисления ее транспортных свойств. Наиболее характерная особенность современных проблем физики высокой плотности энергии (управляемого термоядерного синтеза, взаимодействия мощных потоков энергии и ударных волн с материей, газофазных ядерных реакторов веществом и т. п.) состоит в том, что плазма, возникающая в вышеупомянутых условиях, обладает чрезвычайно высоким спектром термодинамических состояний: от сильно сжатых конденсированных до сходных с идеальным газом, включая области металлизации и фазовых переходов (МЕСЯЦ, ФОРТОВ, 1990). Простейший подход основан на разложениях по плотности, полученных из квантовой статистики и дополняемых построениями Якоби–Паде (KRAEFT et al, 1986, 1988). Этот подход мы кратко объясним в третьей главе предлагаемой книги и применим к простой плазме в четвертой главе. Для многокомпонентной и металлической плазмы необходимо ввести еще и специальные приближения (см. главы 5 и 6).

Точное решение проблемы термодинамического описания плазмы отличается высокой сложностью и выходит за рамки существующей теории (см. главу 3). Из-за этого при создании термодинамических моделей приходится использовать определенные допущения и упрощения. Эти упрощения не являются универсальными, так как относительная значимость физических факторов, определяющих макроскопические свойства материи, отличается в областях с разной температурой и плотностью (EBELING et al., 1976a; ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1984, 1990; СИМОНЕНКО, СИНЬКО, 1988).

Последней прикладной задачей такого рода является анализ строения и эволюции планет-гигантов нашей Солнечной системы — Юпитера, Сатурна, Урана и Нептуна (рис. 2.1.1). Согласно наблюдениям, сделанным космическим исследовательским аппаратом «Вояджер 2», давление и температура плазмы внутри этих планет достигают нескольких сотен Гигапаскалей и нескольких десятков тысяч кельвин соответственно.

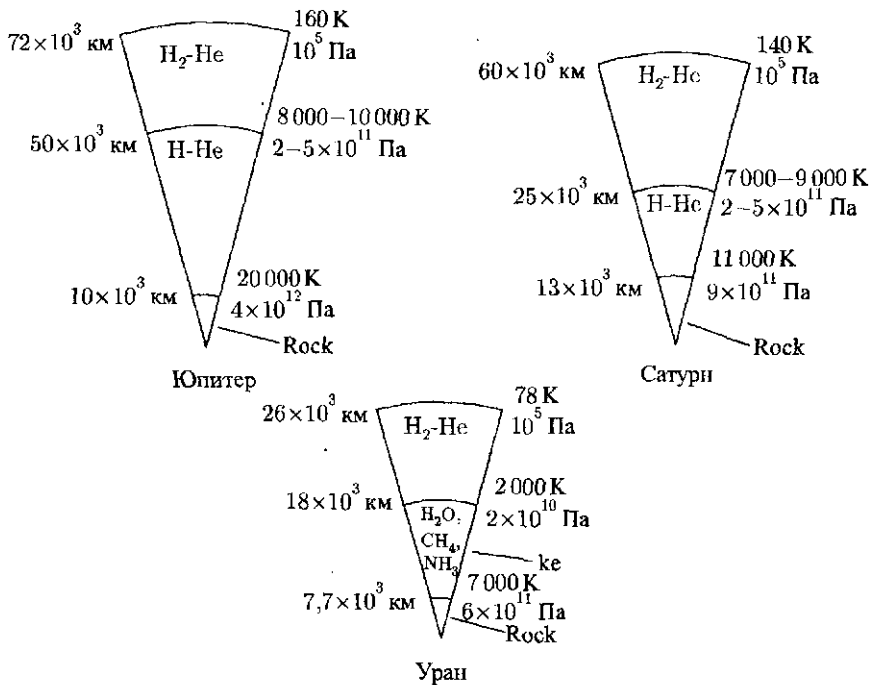


Рис. 2.1.1. Строение планет-гигантов, основанное на уравнениях состояния сильно сжатой плазмы (ROSS, 1989)

Наиболее универсальным считается адиабатическое приближение. Оно справедливо при любых значениях плотности и температуры с точностью, пропорциональной отношению массы электрона m_e к массе ядра m . Основное допущение при этом заключается в том, что движение электрона можно рассматривать при неподвижном ядре. В результате, можно получить по-

тенциальную энергию, которая зависит исключительно от координат ядра, что позволяет отдельно описать движение ядра (MARCH and TOSI, 1984).

Следующим довольно общим приближением является допущение о классическом характере движения ядер, которое нарушается при низких температурах и высоких плотностях. Условием применимости является ограничение, которое накладывается на отношение η тепловой длины волны де Бройля ядра $\Lambda = h(2\pi mk_B T)^{-1/2}$ к радиусу объема, приходящегося на одно ядро $R_0 = (3m/4\pi\rho)^{1/3}$:

$$\eta = \frac{\Lambda}{R_0} = \left(\frac{2}{9\pi}\right)^{1/6} \frac{h\rho^{1/3}}{m^{5/6}(k_B T)^{1/2}} \ll 1.$$

Здесь ρ — плотность массы, m — масса ядра, а T — температура.

Электроны в веществе условно подразделяются на связанные и свободные. Последние также называют проводящими электронами. Связанные электроны локализуются вблизи ядер благодаря сильному электрон-ядерному взаимодействию, движутся вместе с ядрами и всегда выказывают квантовые свойства. При повышении температуры и увеличении плотности связанные электроны становятся свободными. Значение квантовых эффектов в газе, состоящем из свободных электронов, определяется отношением температуры ($k_B T$) к энергии Ферми $\epsilon_F = (h^2/2m_e)(3n_e/8\pi)^{2/3}$, где n_e — плотность электронов.

Конденсированная материя характеризуется неравенством $k_B T \leq \epsilon_F$. При этом условия главенствуют квантовые свойства свободных электронов. Теоретическое описание можно упростить при условии, что концентрация тепловой энергии не достигает значения, при котором связанные электроны могут перейти в возбужденное состояние или частично оторваться. При высоких температурах, когда $k_B T \gg \epsilon_F$, свободные электроны ведут себя как классические частицы.

При снижении плотности и температуры конденсированная материя переходит в газоподобное состояние плавно или пересекает двухфазовые области. Для металлов (при нормальных условиях) условной границей между газообразным и жидким состоянием можно считать положение перехода от металла к диэлектрику. В состоянии плазмы существует область относительно слабого взаимодействия, которая характеризуется малыми значениями параметра неидеальности $\gamma = Ze^2/4\pi\epsilon_0 R_0 k_B T$, представляющего собой отношение средних значений потенциальной и кинетической энергии.

Границу между плазмой и газом на плоскости плотность-температура можно определить, задавая степень ионизации атомов некоторым малым

значением. Газовая фаза материи соответствует системе нейтральных слабо взаимодействующих классических частиц.

Авторы многих работ пренебрегают влиянием температуры и рассматривают такую систему как сильно вырожденную, формально принимая $T = 0$ (MC MAHAN et al., 1981; YOUNG et al., 1981; MEYER-TER-VEHN and ZITTEL, 1988). Эти авторы вычисляют уравнение состояния холодного вещества (например, гелия) при высоком давлении и подробно исследуют переход в металлическое состояние.

Наименее удобна для изучения область плотной плазмы при промежуточных температурах. Наиболее общий метод, который можно применить в этой области, — это рассмотреть движение ядер на основе классической механики. На практике рассматривается модель, которая представляет такую плазму как совокупность электрически нейтральных слабо взаимодействующих ячеек объема v_0 . Область адекватной применимости этой модели, строго говоря, неизвестна, но границы ее физической несостоятельности можно определить с помощью концепции электронного радиуса дебаевского экранирования $r_D = (\epsilon_0 k_B T / e^2 n_e)^{1/2}$. Если свободные электроны не в состоянии экранировать ион в ячейке объема v_0 , то физического основания для использования такой ячейечной модели не существует. В газе, состоящем из вырожденных электронов, длина экранирования определяется как $r_{TF} = (\pi / 3 n_e)^{1/6} (\hbar^2 \epsilon / 4 \pi m_e e^2)^{1/2}$ и может использоваться для определения предела применимости ячейечной модели в этом случае.

Остановимся теперь на ячейечном приближении Вигнера–Зейтца. Каждая ячейка содержит ядро с зарядом Z и соответствующее число электронов, что обеспечивает электрическую нейтральность (ICHIMARU, 1982; КАЛИТКИН, 1989). Движение электронов в поле ядра внутри данной ячейки описывается с помощью выбранной физической модели. Влияние электронов и ядер соседних ячеек учитывается через граничные условия. Обычно вклады ядер и электронов описываются независимо друг от друга в соответствии с адиабатическим приближением. На практике реальная ячейка Вигнера–Зейтца, имеющая сложную геометрическую форму, обычно замещается сферической ячейкой объема v_0 .

Скажем теперь несколько слов о физических моделях, описывающих электронную подсистему. Одним из стандартных подходов является метод функций Грина (KRAEFT et al., 1986), который используется в первой части этой книги. Другой широко распространенный подход представлен теорией Сингви–Тоши–Лэнда–Золандера (SINGWI et al., 1968; MARCH and TOSI, 1984).

К наиболее последовательным и эффективным методам следует отнести теорию функционала плотности (DFT), широко используемую во вто-

рой части этой книги. Данный метод основан на теореме, которая гласит, что свободную энергию электронной системы во внешнем поле можно выразить как функционал электронной плотности. Этот функционал обычно неизвестен, и использование какого-нибудь из приближений порождает так называемые квантово-статистические модели или квантово-механические модели типа Хартри. Использование подхода DFT оказалось очень успешным в физике твердого тела. Результаты, полученные для плотной плазмы, представлены в шестой и седьмой главах.

Среди статистических моделей первой была модель Томаса-Ферми, в которой плотность электронов вычисляется в квазиклассическом приближении с использованием самосогласованного потенциала (КИРЖНИЦ и др., 1975). Когда были приняты во внимание регулярные и осцилляционные поправки, теоретические результаты приблизились к экспериментальным, и в термодинамическую модель были включены оболочечные эффекты.

Область применимости моделей Томаса-Ферми, определенная путем сравнения с результатами динамических экспериментов (ФОРТОВ, 1972), связана с плотностями, подобными плотностям твердых тел при давлениях $p \geq 10^2$ ГПа.

Еще более последовательное описание связанных состояний в плазме реализуется с помощью квантово-механических моделей самосогласованного поля, в которых волновые функции одного электрона являются решениями уравнения Шрёдингера с граничными условиями модели. Последние представляют собой трансляционную симметрию кристаллической решетки или ее приближенное описание. В первых формулировках квантово-механических моделей использовались приближения Томаса-Ферми в сочетании с электростатической теорией.

Модель Хартри-Фока, которая учитывает обменное взаимодействие электронов, является самой полной одноэлектронной моделью, но при этом и самой сложной. Более простое описание обменных эффектов достигается при использовании приближения Хартри-Фока-Слэтера, действующего так называемый локальный эффективный обменный потенциал. В конкретных вычислениях, основанных на модели Хартри-Фока-Слэтера (НИКИ-ФОРОВ и др., 1982), использовалось квазиклассическое приближение для сильно возбужденных состояний связанных электронов и для свободных электронов. Другой исследователь (ROZSNYAI, 1972) предложил очень простые граничные условия, позволяющие смоделировать верхнюю и нижнюю границы энергетических зон электронов. Синько (СИНЬКО, 1983) замкнул эту модель приближением для плотности состояний, имеющей форму характерную для свободных электронов, и предложил так называемую модель самосогласованного поля.

Как мы уже говорили, адиабатическое приближение позволяет отдельно вычислить, какой вклад в различные термодинамические функции вносят электроны, а какой — ядра. В ранних работах ядра рассматривались как идеальный газ. Была разработана модель точечных ионов, находящихся в среде с равномерно распределенным отрицательным зарядом, в которой учитывается неидеальность движения ядер (BRUSH et al., 1966; КОПЫШЕВ, 1977).

Общий недостаток вышеописанных ячеечных моделей, заключается в невозможности учесть межчастичные корреляции на расстояниях, превышающих размеры единичной ячейки. Ячеечные модели не способны описать типичные состояния плазмы, характеризующиеся дальнедействующими корреляциями, когда сфера Дебая содержит большое количество частиц. Модель ограниченного атома (см., например, части 5.2 и 5.3) объединяет идеи как твердого состояния, так и плазмы; еще более простым подходом является «химическая модель» плазмы, описанная в главах 3-5.

2.2. Исторические сведения

Теория заряженных частиц своими корнями уходит в работу Шарля Огюстена Кулона (1736–1806), который в 1785 году открыл закон взаимодействия двух зарядов. В современном написании закон Кулона выглядит так:

$$V_{ij} = z_i z_j \frac{e^2}{r},$$

где r — расстояние между зарядами i и j , z_i и z_j — соответствующие количества единичных зарядов, $e^2 = e^2$ в системе СГС и $e^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$ в системе СИ. Строго говоря, первое экспериментальное свидетельство закона Кулона нашел Генри Кавендиш за тринадцать лет до того, как открыл свой закон Кулон, но Кавендиш не стал публиковать добытые сведения. Гельмгольц был первым, кто признал квантование зарядов, а его последователь Планк первым вычислил величину элементарного заряда

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл.}$$

Лоренц и Томсон первыми постулировали существование электронов $z_e = -1$.

Общей моделью материи как системы, образованной ядрами и электронами, мы обязаны Резерфорду (1911). Потенциал решетки, состоящей из точечных зарядов, впервые вычислил Эвальд (1921) и уточнил Вигнер (1932). Теорию экранирования зарядов ввели Дебай и Хюккель (1923) и позднее

усовершенствовались Маке (1949), Майер (1950), Бом и Пайнс (1953), Линдхардт (1954), Мотт (1959), Веденов и Ларкин (1959), Кельбг и Де Витт (1963), Сингви, Този, Лэнд и Золандер (1968) и другие.

Теория заряженных частиц, безусловно, является самым важным разделом любой теории плазмы. Однако в общем случае плазма содержит как нейтральные, так и заряженные частицы в различных сочетаниях. Две существующие элементарные теории плазмы рассматривают предельные случаи, в которых существуют только электрически нейтральные или заряженные частицы. В первом случае, соответствующем низким температурам и низким плотностям, все электроны остаются в связанном состоянии, плазма ведет себя как обычный газ. Элементарная теория газов восходит к новаторской работе ван дер Ваальса, сделанной около ста двадцати лет назад. Второй случай, как мы уже говорили, связан с работой Дебая и Хюккеля (1923). Анализ частично ионизованной плазмы восходит к М. Н. Саха, который в 1921 году опубликовал в Берлине статью «*Versuch einer Theorie der physikalischen Erscheinungen bei hohen Temperaturen mit Anwendungen auf die Astrophysik*».

При высоких плотностях частиц теория ван дер Ваальса и теория Дебая-Хюккеля не работают. Обобщения теории нейтрального газа на случай высоких плотностей разработали Перкус и Йевик (1962), Карнахан и Старлинг (1969), а также Росс и др. (1980, 1983). Обобщением теории Перкуса-Йевика на заряженные твердые сферы является средне-сферическое приближение (MSA), которое получили Вайсман и Лебовиц (1972), Триоло, Григера и Блюм (1976). Обобщениями средне-сферического приближения мы обязаны Кихаре (1978), Париселло и Този (1979), а также Розенфельду (1980).

Особенно важную роль в развитии теории теплофизических свойств сыграли вычисления Монте-Карло для однокомпонентной плазмы. Начало этому очень плодотворному направлению положили новаторские исследования Брагга, Салина и Теллера (1966), которые продолжили Хансен (1972, 1973), Де Витт (1976), а также Замалин, Норман и Филинов (1977).

Квантово-статистическая теория теплофизических свойств плазмы основана на методах, разработанных Монтроллом и Уорлом (1958), Мартином и Швингером (1959), Веденовым и Ларкиным (1959), Абрикосовым, Горьковым и Дзялюпинским (1962), Кадановым и Беймом (1962), Кельбгом (1963), Де Виттом (1963) и Марчем (1968). С помощью этих работ Колышев (1968) и Эбелинг (1968) получили точные результаты первых поправок для предельных законов. Точные результаты для нижних границ и свойства устойчивости термодинамических функций впервые получили Дайсон и Ленард (1967, 1968), Лебовиц и Либ (1969, 1972), Либ и Тир-

ринг (1975). Решение проблемы связанных состояний тесно связано с работами Мотта (1959), Ларкина (1960), Эбелинга (1966, 1968), Кремпа и Крефта (1968, 1972), Килиманна и др. (1977), Репке и др. (1978). Приближение случайных фаз восходит к работам Бома и Шайнса (1953), Линдхарда (1954), Позьера и Пайлса (1958, 1959), Сингви, Този, Лэнда и Золандера (1968), Ичимару (1973).

Приближение Томаса–Ферми и родственное ему приближение функционала плотности связаны с работами Хохенберга и Кона (1964), Киржница и др. (1975), Либа и Тирринга (1975), Перро (1982), Дарма-Вардана и др. (1982).

Другим направлением является методика кластерного разложения, которая хорошо работает в случае разреженной плазмы. Этот метод восходит к работам Кельбга (1963, 1964), Эбелинга (1968, 1969), Крефта и Кремпа (1968), Роджерса (1971, 1974), Зеленера, Нормана и Филинова (1981).

Метод квантово-статистического моделирования Монте-Карло разработали Цеперли и Олдер (1980, 1981), а также Замалин, Норман и Филинов (1977). Этот метод, вероятно, имеет большие перспективы, но до сих пор находится в зачаточном состоянии.

Расширенные вычисления теплофизических свойств плазмы, основанные на сочетании всех вышеупомянутых методов, были впервые разработаны двумя независимыми группами, расположенными в Москве и Черноголовке (Грязнов и др., 1980; Фортов и Якубов, 1984) и в Ливерморе (Де Витт, 1976; Хаббард и Де Витт, 1986; Росс и др., 1983; Роджерс, 1986, 1988).

В следующих главах мы попытаемся сделать всесторонний обзор некоторых последних достижений в области вычисления теплофизических свойств.

2.3. Безразмерные параметры плазмы

Все физики хорошо знают, что более глубокое понимание сущности любой конкретной системы требует рассмотрения безразмерных параметров. Каковы наиболее характерные безразмерные параметры горячей плотной плазмы?

Рассмотрим плазму, состоящую из свободных электронов с плотностью числа частиц n_e и ядер или ионов с плотностью числа частиц n_z с положительными зарядами ze ($z = 1, \dots, Z$). Мы определяем общую плотность положительных зарядов n_+ и средний заряд выражениями

$$n_+ = \sum_{i=1}^Z n_i, \quad (2.3.1)$$

$$\langle z^p \rangle = n_+^{-1} \sum_{i=1}^Z z_i^p n_i. \quad (2.3.2)$$

Вводя среднее расстояние между электронами

$$d_e = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \quad (2.3.3)$$

и между положительными зарядами

$$d_+ = \left(\frac{3}{4\pi n_+} \right)^{1/3}, \quad (2.3.4)$$

мы определяем два безразмерных параметра корреляции

$$\Gamma_e = \frac{\varepsilon^2}{\theta_e d_e}, \quad (2.3.5)$$

$$\Gamma_+ = \frac{\varepsilon^2}{\theta_+ d_+} \langle z^{5/3} \rangle \langle z \rangle^{1/3}. \quad (2.3.6)$$

Здесь θ_e и θ_+ — усредненные кинетические энергии, включающие вырождение. В классическом случае они имеют вид:

$$\theta_e = \theta_+ = k_B T. \quad (2.3.7)$$

В квантовом же случае они определяются в соответствии с формулой:

$$\theta_k = \frac{p^{2d}}{n_k}, \quad (2.3.8)$$

где p^{2d} — давление идеального газа Ферми. Другими словами,

$$\theta_k = \frac{2k_B T}{n_k \Lambda_k^3} I_{3/2}(\alpha_k), \quad (2.3.9)$$

α_k — безразмерный химический потенциал, $I_{3/2}(x)$ — интеграл Ферми порядка $3/2$, а Λ_k — тепловая длина волны де Бройля (см. раздел 3.1). Границу между классической и квантовой областью можно установить с помощью безразмерного параметра вырождения

$$n_k \Lambda_k^3, \quad (2.3.10)$$

задающего отношение среднего расстояния между частицами, пропорционального $n_k^{-1/3}$, и типичной квантовой длины волны де Бройля, Λ_k

Далее мы определяем параметр, описывающий интенсивность электрон-ионного взаимодействия, выраженном

$$\xi_e = 2\langle z \rangle (I/\theta_e)^{1/2}, \quad (2.3.11)$$

где I — энергия ионизации водорода. Затем мы вводим тепловую длину волны де Бройля для относительного движения ионов и электронов:

$$\lambda_{ii} = \frac{\hbar}{(m_i k_B T)^{1/2}}, \quad \lambda_{ee} = \frac{\hbar}{(m_e k_B T)^{1/2}}, \quad \lambda_{ie} = \frac{\hbar}{(2m_{ie} k_B T)^{1/2}}, \quad (2.3.12)$$

где m_{ie} — приведенная масса для электрон-ионной пары. Используя длину Ландау ℓ ,

$$\ell = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}, \quad (2.3.13)$$

мы можем определить параметры взаимодействия

$$\xi_{ee} = \frac{\ell}{\lambda_{ee}}, \quad \xi_{ii} = \frac{z^2 \ell}{\lambda_{ii}}, \quad \xi_{ie} = \frac{z \ell}{\lambda_{ie}}. \quad (2.3.14)$$

На рис. 2.3.1 и 2.3.2 приведен график соотношения плотности и температуры для однозарядной плазмы ($Z = 1$). Рис. 2.3.1 соответствует случаю масс-симметричной плазмы (электрон-позитронной плазмы, электрон-дырочной плазмы и т.п.), а рис. 2.3.2 — случаю масс-несимметричной плазмы (например, газовой плазмы). Внутри линии $\xi_e = 1$ наблюдаются сильные взаимодействия, а внутри линии $\xi_e = 10$ — очень сильные взаимодействия. Это проявится, например, в эффектах рассеяния и связанных состояний. На рис. 2.3.1 присутствуют кривые $\Gamma_e = 1$ и $\xi_e = 1$, разделяющие области сильных и слабых корреляций и электронных взаимодействий соответственно. Физический смысл выражения $\Gamma_k \geq 1$ состоит в том, что потенциальная энергия больше средней кинетической энергии, а выражения $\xi_k \geq 1$ — в том, что взаимодействия существенны для процессов микроскопического рассеяния, т.е. теория возмущений (борновское приближение) нарушается. Интересно отметить, что как область взаимодействия, так и область неидеальности ограничиваются левым нижним углом плоскости $n - T$. В этом отношении высокая плотность и высокие температуры имеют тот же качественный эффект: взаимодействия и неидеальность играют меньшую роль, и поведением управляет только кинетическая энергия.

Причиной этого эффекта, конечно же, служит сильное увеличение кинетической энергии ферми-газа при высоких температурах и/или высоких плотностях.

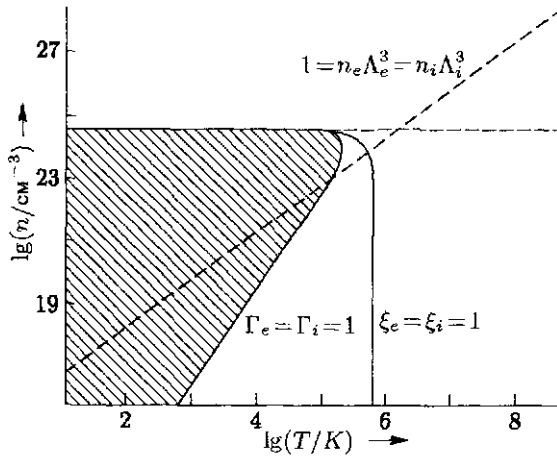


Рис. 2.3.1. Область неидеальности на графике отношения плотности и температуры для симметричной плазмы (например, электрон-позитронной плазмы)

Влияние квантовых эффектов сильно зависит от масс частиц. Следовательно, плоскость $n - T$ для масс-симметричных систем (рис. 2.3.1) имеет гораздо более простую структуру, чем та же плоскость для масс-несимметричной плазмы (рис. 2.3.2). Из рис. 2.3.2 мы видим, что поведение электронов и ионов при высокой плотности существенно отличается вследствие разных значений массы $m_p \gg m_e$. Более легкие электроны достигают вырождения при более низких плотностях. Следовательно, существует промежуточная область,

$$\Lambda_e^{-3} < n < \Lambda_p^{-3}, \quad (2.3.15)$$

где протоны ведут себя по законам классической физики, а электроны образуют вырожденный квантовый газ. В данной области можно ожидать образования ионной решетки или, в конечном счете, молекулярной решетки.

Для примера рассмотрим Солнце. Типичные параметры Солнца:

$$\Gamma_+ < 0,1; \quad 0,01 < \xi < 100. \quad (2.3.16)$$

Это свидетельствует о том, что материя Солнца пребывает в условиях слабой неидеальности, но сильных двухчастичных взаимодействий.

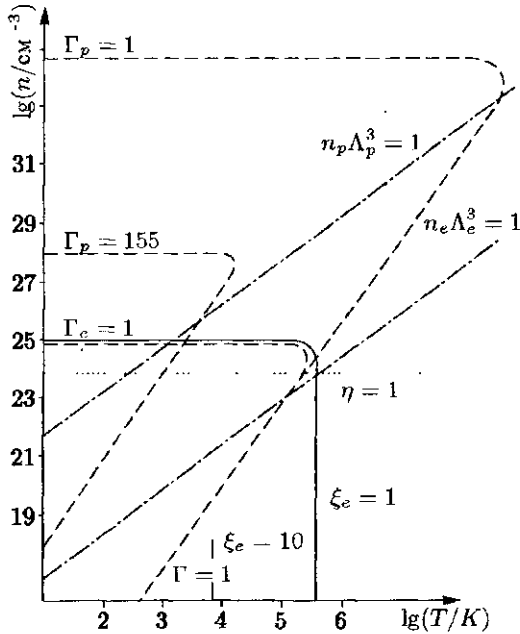


Рис. 2.3.2. Области параметров электрон-протонной плазмы. Штрих пунктирные линии соответствуют границе вырождения электронов и протонов, соответственно. Пунктирная линия соответствует переходу вследствие блокировки Паули

Другим важным параметром является относительная занятость имеющегося пространства связанными состояниями

$$\eta = \frac{4\pi}{3} \sum_b n_b R_b^3, \quad (2.3.17)$$

где n_b и R_b — плотность и эффективный радиус связанного состояния b . В области $\eta > 1$, изображенной на рис. 2.3.2, связанные состояния, требующие относительно большого пространства, разрушаются из-за эффектов блокировки Паули, которые делают существование связанных состояний термодинамически невыгодным.

Термин «блокировка Паули» используется здесь и далее для обозначения специфического класса эффектов, связанных с принципом запрета Паули (KRAEFT et al., 1986, 1988). Из свойств волновой функции по отношению к перестановкам электронов следует, что каждое состояние может

занимать только один электрон. Более того, именно этим объясняется, почему свободные электроны не могут проникнуть во внутреннюю часть атомов. Несмотря на то, что — по крайней мере, в картине Бора — внутренняя часть атомов почти пуста, электроны и другие частицы, содержащие электроны, не могут проникнуть в атомы. В этом и состоит сущность эффектов блокировки Паули, играющих важную роль в горячей плотной плазме.

ГЛАВА 3

Общая термодинамика и кинетика переходов

3.1. Обзор статистико-термодинамических результатов

Сильная теория плотной плазмы требует наличия мощного аппарата квантово-статистической теории (KRAEFT et al., 1986, 1988). Наша книга не сможет охватить все методы квантовой статистики плазмы. Мы ограничиваемся обзором основной части существующих результатов и будем приводить, в основном, не выводы, а простые аргументы. Большинство существующих сильных теорий ограничивается описанием узких областей на плоскости плотность-температура (см. рис. 2.3.1 и 2.3.2).

Начнем со следующего разложения плотности свободной энергии

$$f = f_{id} + f_{vdW} + f_{hc} + f_{Coul}, \quad (3.1.1)$$

где f_{id} - вклад идеального газа, f_{vdW} - вклад притяжения ван дер Ваальса, f_{hc} - вклад твердых сфер, учитывающий близкодствующее отталкивание (эффект исключенного объема), вызванное конечным размером частиц, f_{Coul} - вклад кулоновских взаимодействий, обусловленных электрическими зарядами.

Плотность свободной энергии идеального электронного газа точно известна из статистики Ферми и может быть выражена с помощью интегралов Ферми $I_\nu(x)$:

$$f_{id}^{(e)} = \frac{2k_B T}{\Lambda_e^3} [\alpha_e I_{1/2}(\alpha_e) - I_{3/2}(\alpha_e)], \quad (3.1.2)$$

$$I_\nu(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \int_0^\infty \frac{t^\nu dt}{1 + \exp(t-x)}. \quad (3.1.3)$$

где α_e - это безразмерный идеальный химический потенциал электронов,

$$\alpha_e = \frac{\mu_{e,id}}{k_B T}, \quad (3.1.4)$$

значение которого определяется соотношением

$$2I_{1/2}(\alpha_e) = n_e \Lambda_e^3. \quad (3.1.5)$$

Однако на практике часто пользуются аналитическими выражениями для идеальной свободной энергии электронов, значение которой зависит от плотности и температуры, $f_{id}^{(e)}(n_e, T)$. Существует несколько подобных приближений (PERROT, 1979; КАЛИТКИН, РИГУС, 1981), но в качестве примера мы приведем формулу Циммермана (ZIMMERMANN, 1987):

$$\begin{aligned} f_{id}^{(e)} &= k_B T n_e [\ln y - 1 + 0,1768y - 0,00165y^2 + 0,000031y^3], \\ &\text{если } y < 5,5 \text{ и} \\ f_{id}^{(e)} &= k_B T n_e [0,7254y^{2/3} - 2,0409y^{-2/3} + 0,85y^{-2}], \\ &\text{если } y \geq 5,5. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

$$y = \frac{\bar{n}}{2}, \quad \bar{n} = \frac{h^3 n_e}{(2\pi m_e k_B T)^{3/2}}.$$

Вклад ионов с зарядовым числом z рассчитывается на основе стандартной формулы без учета вырождения:

$$f_{id}^{(z)} = k_B T n_z \left[\ln \frac{n_z \Lambda_z^3}{\sigma_z} - 1 \right], \quad (3.1.7)$$

где σ_z — внутренняя статистическая сумма.

Существует альтернативный теоретический подход, в котором каждое связанное состояние описывается по-своему. В основе подхода лежит идея, согласно которой каждое (внутреннее) состояние связанных частиц (атомов, молекул и ионов) представляется в виде отдельной частицы со своими специфическими свойствами, такими как заряд и эффективный объем, а также относительное число заполнения. Подобный подход развил Роджерс (ROGERS, 1986), именно он применяется в настоящее время при расчетах непрозрачностей Солнца и уравнения состояния вещества недр Солнца. Существует также другой аналогичный подход (HUMMER, MIHALAS and DÄPPEN, 1988). В отличие от метода Роджерса (разложение в ряд по активностям), наш подход основывается на разложении по плотности (в каноническом ансамбле), преимуществом которого является более простое обобщение на кинетические процессы. Еще одним преимуществом подхода можно назвать достаточно хорошую сходимость разложения по плотности, по сравнению со сходимостью разложения по термодинамическим фугитивностям (EBELING, 1969; EBFLING et al., 1976a; KRAEFT

et al., 1986, 1988). Идеальные составляющие плотности свободной энергии в рамках данного подхода рассчитываются за счет суммирования по всем связанным состояниям. Вклад каждого связанного состояния можно выразить соотношением:

$$f_{id}^{(k)} = n_k E_k + k_B T n_k \left[\ln \frac{n_k \Lambda_k^3}{g_k} - 1 \right]. \quad (3.1.8)$$

Статистический вес равен:

$$\bar{g}_k = \left[1 - \exp\left(-\frac{E_k}{k_B T}\right) + \frac{E_k}{k_B T} \exp\left(-\frac{E_k}{k_B T}\right) \right] g_k, \quad (3.1.9)$$

где g_k — обычный статистический вес связанного состояния k . Множитель перед g_k соответствует процедуре обрезания Бриллюэна-Планка-Ларкина (см. раздел 3.2).

Для описания области сильных взаимодействий, где преобладают атомы и молекулы,

$$\xi > 10. \quad (3.1.10)$$

одной из самых точных теорий является вариационная теория жидкостей (ROSS et al., 1983; ROSS and YOUNG, 1986). Вклад кулоновских взаимодействий для данной области, в которой присутствуют лишь нейтральные частицы, равен нулю. В однокомпонентных системах вклад твердых сфер можно представить в виде следующего приближенного выражения (CARNAHAN and STARLING, 1969):

$$f_{hc} = nk_B T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad (3.1.11)$$

в котором $\eta = \frac{4\pi n}{3} R^3$ — параметр упаковки, а n и R — плотность и радиус частиц, соответственно. Вклад притяжения ван дер Ваальса согласно теории возмущений (ROSS et al., 1983) равен:

$$f_{vdW} = 4\pi n^2 \int_R^\infty \Phi(r) g_{HS}(r, \eta) r^2 dr. \quad (3.1.12)$$

Здесь $\Phi(r)$ — эффективный потенциал взаимодействия нейтральных частиц. $g_{HS}(r, \eta)$ — радиальная корреляционная функция для твердых сфер. Радиус R в данной теории выступает в качестве варьируемого параметра. Одним

из самых известных выражений для потенциала взаимодействия является уравнение потенциала Леннарда-Джонса (BARKER, 1976):

$$\Phi(r) = 4 \cdot \left[\left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-12} - \left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-6} \right]. \quad (3.1.13)$$

Данный потенциал взаимодействия характеризуется двенадцатой степенью отталкивания и шестой степенью притяжения. Однако, с физической точки зрения, сила отталкивания в данном случае искажается, поскольку применяемые квантово-механические расчеты демонстрируют тот факт, что сила отталкивания ослабевает на коротких межмолекулярных расстояниях. Более точно потенциал рассчитывается на основе потенциала $\exp -6$ (ROSS and REE, 1980):

$$\Phi(r) = \varepsilon \left\{ \frac{6}{\alpha - 6} \exp \left(\alpha \frac{r_m - r}{r_m} \right) - \frac{\alpha}{\alpha - 6} \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right\}. \quad (3.1.14)$$

Здесь выражение для экспоненциального отталкивания соответствует данным рассеяния молекулярных лучков и, согласно теоретическим исследованиям, ведет к корректным результатам даже для случая коротких межмолекулярных расстояний. В таблице 3.1.1 приведены некоторые типичные значения параметров потенциала шестой степени (ROSS and REE, 1980; ROSS et al., 1983; ROSS and YOUNG, 1986):

Таблица 3.1.1. Значения параметров потенциала шестой степени для некоторых газов

Газ	ε/k_D	r_m	α
H ₂ , D ₂	36,4 К	3,49 Å	11,1
He	10,8 К	2,97 Å	13,1
Xe	235 К	4,47 Å	13,0

В составе реальной плазмы довольно часто встречается несколько разновидностей нейтральных частиц, поэтому применительно к смеси твердых сфер разного диаметра необходимо использовать более совершенные теории. В наших расчетах мы опираемся на уравнения, разработанные Мансури и др. (MANSOORI et al., 1971), в сочетании с простыми приближениями для сил притяжения на уровне второго вириального коэффициента (EBELING et al., 1988),

$$f_{hc} = f_{Mans}, \quad (3.1.15)$$

$$\begin{aligned}
 f_{vdW} &= k_B T \sum n_i n_j A_{ij}, \quad A_{ij} = \\
 &= 2\pi \int_{R_i+R_j}^{\infty} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Phi_{ij}(r)}{k_B T}\right) \right] r^2 dr. \quad (3.1.16)
 \end{aligned}$$

В качестве справочной информации мы также приводим полное описание формулы Мансури:

$$\begin{aligned}
 f_{Mans} &= nk_B T \left[-\frac{3}{2}(1 - y_1 + y_2 + y_3) + \frac{3y_2 + 2y_3}{1 - \eta} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{3}{2} \frac{1 - y_1 - y_2 - \frac{1}{3}y_3}{(1 - \eta)^2} - (y_3 - 1) \ln(1 - \eta) \right], \\
 y_1 &= \sum_i \sum_{j>i} \Delta_{ij} \frac{d_i + d_j}{(d_i d_j)^{1/2}}, \\
 y_2 &= \sum_i \sum_{j>i} \Delta_{ij} \sum_k \frac{\eta_k (d_i d_j)^{1/2}}{\eta d_k}, \\
 y_3 &= \left[\sum_i \left(\frac{\eta_i}{\eta}\right)^{2/3} \left(\frac{n_i}{n}\right)^{1/3} \right]^3, \\
 \Delta_{ij} &= \frac{(\eta_i \eta_j)^{1/2} (d_i - d_j)^2 (n_i n_j)^{1/2}}{\eta d_i d_j n}, \\
 \eta &= \sum_i \eta_i, \quad \eta_i = \frac{\pi n_i}{6} d_i^3. \quad (3.1.17)
 \end{aligned}$$

Здесь n_i и d_i — плотности и диаметры частиц, а n — общее количество частиц.

$$n = \sum_i n_i.$$

В оригинальной работе (MANSOORI et al., 1971) суммирование по i и j выполнялось для всех протяженных частиц, т.е. таких частиц, диаметр

которых с точки зрения физики не обращается в нуль. Мы считаем необходимым дополнительно суммировать и соответствующие значения для электронов с диаметром $d_e = 0$ (EBELING et al., 1988). Такая поправка на точечные заряды означает, что в выражении для твердых сфер будет присутствовать дополнительный член:

$$f_{Mans}^{с\ точечными\ зарядами} = f_{Mans}^{только\ протяженных\ частиц} - n_e k_B T \ln(1 - \eta). \quad (3.1.18)$$

В случае невырожденных электронов данный поправочный член соответствует уменьшению объема в идеальном вкладе электронов согласно соотношению:

$$n_e k_B T \left[\ln \frac{N_e \Lambda_e^3}{2V} - 1 \right] - n_e k_B T \ln(1 - \eta) = n_e k_B T \left[\ln \frac{N_e \Lambda_e^3}{2V_{eff}} - 1 \right], \quad (3.1.19)$$

где

$$V_{eff} = V(1 - \eta) = V - V_{occ}. \quad (3.1.20)$$

Здесь $V_{occ} = \eta V$ — объем, занимаемый протяженными частицами, такими как атомы и ионы. V_{eff} — эффективный свободный объем, который может быть занят электронами. Видно, что включение точечных зарядов во вклад твердых сфер имеет следующий физический смысл (EBELING et al., 1988): замена полного объема в идеальном вкладе точечных зарядов на доступный, т. е. не занятый объем ($V - V_{атомов} - V_{ионов}$). Поскольку электроны не могут проникать во внутреннюю часть атомов или ионов, эффективный объем V_{eff} не совпадает с общим объемом V .

Однако такой подход (уравнение (3.1.18)) оказывается справедливым лишь для Больцмановских частиц. В нем не учитываются квантовые эффекты, которые достаточно существенны для свободных электронов при больших плотностях. Опираясь на работу Фёрстера и Кальбаума (FÖRSTER and KANLBAUM, 1990b), в таких случаях мы предлагаем использовать особое обобщенное выражение для произвольной степени вырождения, что приводит к получению корректных результатов расчета для уравнений (3.1.18)–(3.1.20) в классическом пределе, а также учитывает концепцию приведенного объема в квантовом пределе. Эффект исключенного объема достигается путем замены первоначального объема V в выражении для идеальной свободной энергии $F_{id}^{(e)}$ электронов на эффективный объем $V(1 - \eta)$. Тогда плотность свободной энергии электронов равна:

$$f_{id}^{(e)} = k_B T \alpha_e^{eff} n_e - (1 - \eta) \frac{2k_B T}{\Lambda_e^3} I_{3/2}(\alpha_e^{eff}), \quad (3.1.21)$$

где эффективный безразмерный химический потенциал электронов α_e^{eff} вычисляется из уравнения (сравните с уравнениями (3.1.2)–(3.1.5)):

$$2I_{1/2}(\alpha_e^{eff}) = \frac{n_e \Lambda_e^3}{(1 - \eta)}. \quad (3.1.22)$$

Заметим, что значения величин, приходящихся на единицу объема (например, $f = F/V$ и $n_e = N_e/V$) рассчитываются с использованием полного объема V . Чем больше значение отношения V_{eff}/V , тем выше показатель для $(1 - \eta)$.

Существует еще один предельный случай, имеющий не меньшее значение, — это классическая кулоновская жидкость, состоящая из тяжелых заряженных частиц (протонов, ядер дейтерия, а также ядер с более высоким зарядом), находящихся в однородной среде электронов в условиях электро-нейтральности. Для этой модели существует множество результатов, полученных методом Монте-Карло. Плотность свободной энергии может быть аппроксимирована следующим аналитическим выражением (DE WITT, 1976; ROSENFELD, 1980, 1982):

$$f_{Coul} = -1,447n_+^{4/3} \varepsilon^2 \langle z^{5/3} \rangle \langle z \rangle^{1/3}. \quad (3.1.23)$$

Вместо данного простого выражения для большей точности также применяют следующее (EBELING, 1989b, 1990a):

$$f_{Coul} = -n_+ k_B T e(n \langle z^{5/3} \rangle^3 \langle z \rangle, r_s, \tau), \quad (3.1.24)$$

где

$$\begin{aligned} e(x, y, z) &= e_1(x) + e_2(x, y, z), \\ e_1(x) &= 1,4474x^{1/3} - 4,2944x^{1/12} + 0,6712x^{-1/12} + \\ &\quad + (0,2726 \ln x + 2,983), \\ e_2(x, y, z) &= \frac{0,8511yx^{1/12}}{(1 + 0,3135x^{-1/12})(1 + 1,137yz^{1/2})} + \\ &\quad + \frac{yx^{1/3}(0,0726 + 0,0161y)}{(1 + 0,0887y^2)}. \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

Вернемся к обсуждению средне-сферических приближений для вклада электронов. Рассматривая классическую систему, состоящую из заряженных твердых сфер диаметром d и разными значениями заряда ($z_i e$), можно

получить следующее выражение для свободной энергии (WAISMAN and LEBOWITZ, 1972):

$$f_{Coul} = -k_B T \frac{\kappa^3}{12\pi} \tau(\kappa d), \quad (3.1.26)$$

$$\tau(x) = \frac{1}{x^3} \left[2 + 6x + 3x^2 - 2(1 + 2x)^{3/2} \right], \quad (3.1.27)$$

где

$$\kappa^2 = 4\pi(\beta e^2) \sum_i n_i z_i^2. \quad (3.1.28)$$

Отметим, что в кулоновской системе, описываемой уравнениями (3.1.26)–(3.1.28), существует плазменный фазовый переход, характер протекания которого описали Эбелинг и Григо (EBELING and GRIGO, 1980). Обобщение уравнений (3.1.26)–(3.1.27) на случай разных диаметров $\{d_i\}$ получено в работе (PARINELLO and TOSI, 1979). Для внутренней энергии и плотности свободной энергии выражения имеют вид:

$$u_{Coul} = -e^2 \left\{ K \sum_i \frac{n_i (z_i^*)^2}{1 + K d_i} + \frac{\pi}{2\Delta} \Omega P_n^2 - \frac{1}{2} \pi \rho \sum_i n_i z_i d_i^2 + \frac{1}{30} \pi^2 \rho^2 \sum_i n_i d_i^5 \right\}, \quad (3.1.29)$$

$$f_{Coul} = k_B T \frac{K^3}{3\pi} + u_{Coul}, \quad (3.1.30)$$

где значения параметров вычисляются из следующих алгебраических уравнений:

$$K^2 = \pi \beta e^2 \sum_i n_i \left(\frac{z_i^* - \frac{\pi}{2\Delta} d_i^2 P_n}{1 + K d_i} \right)^2, \quad (3.1.31)$$

$$z_i^* = z_i - \frac{\pi}{6} \rho d_i^3, \quad (3.1.32)$$

$$\Delta = 1 - \frac{\pi}{6} \sum_i n_i d_i^3, \quad (3.1.33)$$

$$\Omega = 1 + \frac{\pi}{2\Delta} \sum_i \frac{n_i d_i^5}{1 + K d_i}, \quad (3.1.34)$$

$$P_n = \frac{1}{\Omega} \sum_i \frac{n_i z_i^+ d_i}{1 + K d_i}, \quad (3.1.35)$$

$$\rho = \sum_i n_i z_i.$$

Существует два способа применения данных формул к плазме:

(I) Электроны рассматриваются в виде отрицательно заряженной фоновой среды, имеющей плотность ρ , тогда суммирование значений по i производится только для ионов.

(II) Электроны рассматриваются в виде отдельных отрицательных единичных зарядов ($z_e = -1$) с нулевым диаметром ($d_e = 0$). Тогда суммирование производится для всех возможных частиц, включая и электроны, а плотность ρ берется равной нулю.

До сих пор мы рассматривали методы, которые можно считать классическими. Теперь кратко опишем квантово-статистический метод функций Грина, опираясь на работу Крефта и др. (KRAEFT et al., 1986, 1988).

Как правило, большинство квантово-статистических методов описывают лишь малую часть плоскости плотность температура. Главным преимуществом использования техники функции Грина является тот факт, что она позволяет описать, по крайней мере, целый «угол корреляций». Опишем функцию Грина n -го порядка (KRAEFT et al., 1988):

$$G_n(1 \dots n, 1' \dots n') = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \langle T \{ a(1) \dots a^+(n') \} \rangle. \quad (3.1.36)$$

Одночастичная и двухчастичная функции Грина позволяют построить термодинамические функции, а также определить макроскопические свойства системы, например, коэффициенты переноса и оптические свойства. Для анализа функции Грина можно воспользоваться теоремой, согласно которой n -частичная функция Грина представляется в виде суммы вкладов, соответствующих всем топологически неэквивалентным связным диаграммам Фейнмана, начиная с открытых концов $1, 2, \dots, n$ и заканчивая открытыми концами $1', 2', \dots, n'$. На практике для удобства необходимо свести расчеты к анализу лишь определенных подклассов диаграмм. Для получения более реалистичного описания кулоновских систем необходимо просуммировать бесконечные классы диаграмм, что соответствует следующим явлениям (см. рис. 3.1.1):

- (а) экранирование взаимодействия (суммирование цепочек),
- (б) образование связанных состояний групп элементарных частиц, таких как атомы и молекулы (суммирование лестничных диаграмм), и
- (с) химическое равновесие между свободными и связанными состояниями (суммирование по квазичастицам).

В общем случае сложение отдельных классов диаграмм равнозначно решению линейных интегральных уравнений.

Например, динамически экранированный потенциал соответствует решению уравнения (см. рис. 3.1.1(i)):

$$V(q, \omega) = V(v) + V(q)\Pi(q, \omega)V(q, \omega). \quad (3.1.37)$$

В простейшем случае поляризационный оператор можно представить в приближении случайных фаз (ПСФ):

$$\Pi^{\text{ПСФ}} = G_1^0 G_1^0. \quad (3.1.38)$$

Аналогичным образом одночастичная функция Грина соответствует одночастичной собственно-энергетической части $\Sigma_1(1, 1')$ согласно уравнению Дайсона:

$$G_1(1, 1') = G_1^0(1, 1') + G_1^0(1, 1'')\Sigma_1^0(1'', 1^0)G_1(1^0, 1'). \quad (3.1.39)$$

Мапубаровская функция Грина равна:

$$G_1(p, z) = [\hbar z - E(p) - \Sigma_1(p, z)]^{-1}. \quad (3.1.40)$$

Ввести квазичастицы можно посредством следующего простого приближения:

$$\Sigma_1 = V^S G_1. \quad (3.1.41)$$

Данная аппроксимация приводит к дебаевским сдвигам энергии.

Сильные межчастичные корреляции и особенно образование связанных состояний требуют суммирования всех лестничных диаграмм, которые соответствуют уравнению (см. рис. 3.1.1(ii))

$$G_2^L = G_2^0 + G_2^0 V G_2^L. \quad (3.1.42)$$

Параметр G_2^L называется лестничным приближением для G_2 , в пределе низких плотностей $G_2^0 = [\hbar z - \varepsilon_1 - \varepsilon_2]^{-1}$. Используя лестничное приближение для G_1 на основе уравнения

$$\Sigma_1^L G_1^0 = V G_2^L, \quad (3.1.43)$$

можно оценить влияние связанных состояний на величину G_2 .

$$\begin{aligned}
 (i) \quad & \text{wavy} = \text{---} + \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} + \dots \\
 & = \text{---} + \text{---} \circ \text{wavy} \\
 (ii) \quad & \boxed{G_2^L} = \text{---} + \chi + \boxed{I} + \boxed{IX} + \boxed{II} + \boxed{IIX} + \dots \\
 & = \text{---} - \chi + \boxed{G_2^L} \\
 (iii) \quad & \text{wavy} = \text{---} \text{---} \circ \text{---} \text{wavy} \\
 & \circ \text{---} = \text{---} \circ + \text{---} \circ \boxed{G_2^L} \text{---} + \dots \\
 (iv) \quad & \boxed{G_2} = \boxed{G_2^L} + \boxed{G_2^L} \Sigma_2 \boxed{G_2} \\
 & \Sigma_2 = \text{---} \boxed{G_2^L} \text{---} + \dots \\
 (v) \quad & \Sigma_2 = \boxed{T_2^L} + \boxed{T_3^L} + \boxed{T_1^L} + \dots \\
 (vi) \quad & \boxed{G_2} = \boxed{G_2^L} + \boxed{T_3^L} + \boxed{G_2^L} \boxed{G_1} \boxed{G_2^L} + \dots
 \end{aligned}$$

Рис. 3.1.1. Суммирование бесконечных классов диаграмм Фейнмана, характерных для кулоновских систем. (i) цепное суммирование; (ii) лестничное суммирование; (iii) более сильное экранирование; (iv) усовершенствованное лестничное суммирование; (v) одночастичная собственно энергетическая часть в лестничном приближении; (vi) двухчастичный пропагатор в четырехчастичном приближении

Среди огромного количества диаграмм нам необходимо выбрать только такие, которые соответствуют углу корреляций. С этой целью мы как правило используем «химическую модель»: связанные состояния эквивалентны новым составным частицам. Элементарные и составные частицы должны рассматриваться на одних и тех же основаниях (EBELING, 1974).

Таким образом, диаграмму, содержащую пропагаторы свободных частиц G_1^0 , необходимо дополнить соответствующей диаграммой, содержа-

щей пропагатор составных частиц. К примеру, приближение случайных фаз для Π раскладывается на поляризуемости двух- и n -частичных комплексов (рис. 3.1.1 (iii)).

Более подробное описание подобной процедуры содержится в работе Редмера и Рёпке (REDMER and RÖPKE, 1985). Аналогичным образом уравнение Дайсона для одночастичной функции Грина, дающее квазичастичную картину, дополняется уравнением типа Дайсона для новых (в данном случае составных) частиц (рис. 3.1.1 (iv)):

$$G_2 = G_2^L + G_2^L \Sigma_2 G_2. \quad (3.1.44)$$

Крефт и др. (KRAEFT et al., 1986) исследовали влияние окружающей плазмы на двухчастичные состояния. Ниже мы кратко рассмотрим выражения для энергетических сдвигов двухчастичных связанных состояний.

При разложении одночастичной собственноэнергетической части может иметь смысл введение кластеров (рис. 3.1.1 (v)). Аналогично можно получить разложение G_2 более высокого порядка (рис. 3.1.1 (iv)).

Для расчета термодинамических функций мы будем использовать следующие уравнения:

$$n(\beta, \mu) = \frac{1}{V} \sum_p \int \frac{d\omega}{2\pi} f_1(\omega) \text{Im} G_1(p\omega), \quad (3.1.45)$$

$$p(\beta, \mu) = \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' n(\beta, \mu'). \quad (3.1.46)$$

С учетом приближений для G_1 , описанных выше, мы приходим к выражениям для уравнения состояния, в котором фигурирует не только одночастичный вклад, но и n -частичный вклад. Например (REDMER and RÖPKE, 1985),

$$n(\beta, \mu) = \sum_p f_1(\varepsilon_1) + \sum_{nP} g_2(E_{nP}) + \sum \int d\omega g_2(\omega) \frac{d}{d\omega} \sin \delta(\omega), \quad (3.1.47)$$

где $\delta(\omega)$ -- обобщенная фаза рассеяния, зависящая от плотности. Энергетические уровни включают сдвиги первого порядка теории возмущений:

$$\varepsilon_1 = \frac{p^2}{2m} + \Delta_p^{\text{свободн.}} + \Delta_p^{\text{связанн.}}, \quad (3.1.48)$$

$$E_{nP} = E_{nP}^0 + \Delta_{nP}^{\text{свободн.}} + \Delta_{nP}^{\text{связанн.}}. \quad (3.1.49)$$

Зависимость двухчастичных связанных состояний от плотности будет рассмотрена ниже (см. разделы 3.5 и 4.6).

Интегрируя уравнение (3.1.45) согласно уравнению (3.1.46), получаем следующее выражение:

$$p = p_{id}^{(1)}(\beta, \mu) + p_{id}^{(2)}(\beta, \mu) + \dots + p_{int}(\beta, \mu). \quad (3.1.50)$$

Здесь первый член соответствует свободным одночастичным состояниям, второй член — двухчастичным связанным состояниям, а последний член — взаимодействию квазичастиц.

Таким образом, мы представили давление в виде суммы вкладов свободных квазичастиц и вклада, обусловленного взаимодействиями квазичастиц.

До сих пор мы разрабатывали теорию в большом каноническом ансамбле. Такое представление хорошо подходит для описания химических связей, но оно недостаточно хорошо описывает аддитивные силы. К тому же, в рамках этой техники достаточно сложно обнаружить фазовые переходы первого рода.

Следовательно, переход к смешанному представлению, химической картине оказывается более предпочтительным. Рецепт для такого перехода дает принцип эквивалентности: связанные состояния рассматриваются аналогично свободным частицам (EBELING, 1969, 1974, 1990b). С учетом этого химические потенциалы квазичастиц равны:

$$\begin{aligned} \mu_1^{(\nu)} &= \mu + \Delta_\nu(0), \\ \mu_2^{(\nu)} &= \mu(1) + \mu(1') + E_n^0 + \Delta_n(0), \end{aligned} \quad (3.1.51)$$

где $\Delta_\nu(0)$ и $\Delta_n(0)$ — сдвиги в основании энергетических зон. Индекс ν относится к случаю, когда G_1 описывает структуру энергетической зоны, например, в кристаллических состояниях. В новом представлении мы легко приходим к каноническому ансамблю:

$$\begin{aligned} f(\beta, n_1^{(\nu)}, n_2^{(\nu)}, \dots) &= \sum_\nu f_{id}^{(\nu)}(\beta, \mu_{1,id}^{(\nu)}) + \sum_n f_{id}^{(n)}(\beta, \mu_{2,id}^{(n)}) - \\ &\quad - p_{int}(\beta, \mu_{1,id}^{(\nu)}). \end{aligned} \quad (3.1.52)$$

Закрывающие уравнения, в которых содержатся необходимые соотношения между плотностями и химическими потенциалами, имеют вид:

$$\begin{aligned} n_1^{(\nu)} &= \sum_p f_1(\varepsilon_1^0, \beta, \mu_{1,id}^{(\nu)}), \\ n_2^{(n)} &= \sum_p g_2(E_{n,p}^0, \beta, \mu_{2,id}^{(n)}). \end{aligned} \quad (3.1.53)$$

Наконец, мы должны потребовать минимума свободной энергии по отношению к различным вариантам деления частиц по химическим сортам:

$$f(\beta, n_1^{(\nu)}, n_2^{(\nu)}, \dots) = \min, \quad (3.1.54)$$

$$n = \sum_{\nu} n_1^{(\nu)} + \sum_n n_2^{(n)} + \dots \quad (3.1.55)$$

Еще раз обращаем ваше внимание, что границу между связанным и свободным состояниями можно рассматривать в качестве свободного вариационного параметра.

Уравнения (3.1.51)–(3.1.54) в совокупности представляют «квазихимическую картину», на основе которой можно описать многие явления, типичные для кулоновских систем, такие как ионизация, образование атомов и молекул, зонная структура электронных состояний и др.

Стоит заметить, что переход к химическому описанию можно осуществить альтернативным методом (KRAEFT et al., 1986; ZIMMERMANN, 1988), который основан на «химической» интерпретации не давления (уравнение (3.1.50)), а плотности (уравнение (3.1.47)). Эти два подхода приводят к разным выражениям для термодинамических функций и, особенно, к разным законам действующих масс. На практике данные различия оказываются незначительными, поэтому ими можно пренебречь. Однако, с теоретической точки зрения, подход, основанный на «химической» интерпретации давления (EBELING et al., 1976a, 1986b), более логичен, будучи внутренне согласованным. Проводя анализ, мы пришли к выводу, что подход, в основе которого лежит «химическая» интерпретация плотности (KRAEFT et al., 1986; ZIMMERMANN, 1988), приводит к определенным физическим трудностям.

Более глубокой причиной проблем, возникающих при такой интерпретации плотности является тот факт, что давление можно легко разложить на две составляющие (идеальную и обусловленную взаимодействиями), тогда как общая плотность может складываться исключительно из идеальных вкладов (частичных плотностей). Другими словами, плотность является строгой суммой других плотностей, физика требует аддитивности. Поэтому представление плотности на основе уравнения (3.1.47) ошибочно ведет к выводу, что частицы являются идеальными. Интерпретация на основе уравнения (3.1.50) эластичнее, поскольку она допускает выделение составляющей, обусловленной взаимодействиями. Это ведет к картине, включающей взаимодействующие частицы.

3.2. Разложение при низких плотностях

В данной книге мы не приводим точный вывод квантово-статистических результатов. Мы ссылаемся на уже существующие монографии (EBELING et al., 1976a; KRAEFT et al., 1986, 1988) и на будущие издания из серии «TEUBNER-TEXTE zur Physik». Далее мы приведем лишь окончательные результаты разложения при низких плотностях, а также рассмотрим принципы перехода к примененной химической модели (EBELING, 1969, 1974, 1990b).

Начнем с уравнения состояния, в котором содержатся первые поправки к идеальногозавому закону. Асимптотически правильное с точки зрения квантовой статистики выражение имеет вид:

$$\begin{aligned} \beta p = & \sum_a n_a - \frac{\kappa^3}{24\pi} - 2\pi \sum_{ab} n_a n_b \left\{ \frac{1}{6} (\beta e_a e_b)^3 \ln |A \beta e_a e_b \kappa| - \right. \\ & \left. - \frac{\pi^{1/2}}{4} \theta(-e_a e_b) \lambda_{ab} (\beta e_a e_b)^2 \right\} - 4\pi^{3/2} \sum_{ab} \theta(-e_a e_b) \lambda_{ab}^3 \times \\ & \times \sum_{s=1}^{\infty} s^2 [\exp(-\beta L_s^{ab}) - 1 + \beta E_s^{ab}] n_a n_b + O(n^{5/2} \ln n). \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

Здесь n_a и e_a — плотность и заряд частиц, на основе которых определим следующие величины:

$$\begin{aligned} \beta = \frac{1}{k_B T}; \quad A = \exp(2C_E + \ln 3 - \frac{4}{3}), \quad \kappa^2 = 4\pi\beta \sum_a n_a e_a^2, \\ \lambda_{ab} = \frac{\hbar}{(2m_{ab} k_B T)^{1/2}}, \quad E_s^{ab} = -\frac{e_a^2 e_b^2 m_{ab}}{2\hbar^2 s^2}, \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \geq 0 \\ 0, & \text{если } x < 0 \end{cases}$$

Анализ уравнения состояния доказывает тот факт, что существует лишь один класс (квадратичных) вкладов, который можно сопоставить с образованием связанных состояний. Таким образом, выражение

$$\begin{aligned} n_s^{(ab)} = & 8\pi^{3/2} \lambda_{ab}^3 s^2 [\exp(-\beta E_s^{ab}) - 1 + \beta E_s^{ab}] n_a n_b + \\ & + O(n^{5/2} \ln n) \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

определяет плотность связанных частиц в квантовом состоянии s . Обратите внимание, что в данной модели каждое связанное состояние рассматривается как отдельный сорт частиц.

Общее количество связанных частиц равно:

$$n^{(ab)} = \sum_{s=1}^{\infty} n_s^{(ab)} = 8\pi^{3/2} \lambda_{ab}^3 \sigma(T) n_a n_b + O(n^{5/2} \ln n), \quad (3.2.4)$$

где

$$\sigma(T) = \sum_{s=1}^{\infty} s^2 [\exp(-\beta E_s) - 1 + \beta E_s]. \quad (3.2.5)$$

Последнее выражение известно под названием статистической суммы Бриллюэна-Планка-Ларкина. Очевидно, что сходимость суммы по состояниям достигается за счет вычитания первых двух членов экспоненциального ряда.

В квазихимическом представлении уравнение состояния имеет вид:

$$\begin{aligned} \beta p = & \sum_a n_a^* + \sum_s \sum_{(ab)} n_s^{(ab)} - \left(\frac{\kappa^3}{24\pi} \right)^* - 2\pi \sum_{ab} n_a^* n_b^* \left\{ \frac{1}{6} (\beta e_a e_b)^3 \times \right. \\ & \times \ln |A\beta e_a e_b x| - \frac{1}{4} \pi^{1/2} \theta(-e_a e_b) \lambda_{ab} (\beta e_a e_b)^2 \left. \right\} + \\ & + O(n^{*5/2} \ln n^*). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

В данном выражении все плотности, помеченные символом звездочки, относятся к свободным электронам или ядрам. С этой точки зрения, химическая модель соответствует картине квазичастиц, что является значительным формальным упрощением.

Плотность свободной энергии для химической модели определяется согласно выражениям:

$$\begin{aligned} f = & f_{id} + f_{Coul}, \\ f_{id} = & k_B T \sum_a n_a^* [\ln(n_a^* \Lambda_a^3) - 1] + \\ & + k_B T \sum_s \sum_{(ab)} n_s^{(ab)} \left\{ \ln \left(\frac{n_s^{(ab)} \Lambda_{(ab)}^3}{\sigma_s(T)} \right) - 1 \right\}, \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

где

$$\Lambda_{ab} = \frac{\hbar}{(2\pi m_{ab} k_B T)^{1/2}}, \quad (3.2.8)$$

$$\sigma_s(T) = s^2 [\exp(-\beta E_s) - 1 + \beta E_s].$$

В области взаимодействия имеем:

$$f_{Coul} = -k_B T \left[\frac{\kappa^3}{12\pi} + 2\pi \sum_{ab} n_a^* n_b^* \left\{ \frac{1}{6} (\beta e_a e_b)^3 \ln |B \beta e_a e_b| - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{4} \pi^{1/2} \theta(-e_a e_b) \lambda_{ab} (\beta e_a e_b)^2 \right\} + O(n^{*5/2} \ln n^*) \right], \quad (3.2.9)$$

$$B = \exp(2C_E + \ln 3 - \frac{11}{6}) \approx 1,5215.$$

Полученный результат лишь асимптотически верен; он справедлив для области

$$\xi_{ie} \gg 1,$$

т.е. для области относительно низких температур. Теперь приведем более полный результат, который включает более высокие порядки по плотности (CZERWON, 1972; KRIENKE et al., 1975; EBELING, 1977). Для удобства будем опускать символ звездочки при обозначении плотностей в тех случаях, когда это не ведет к двусмысленности. В области низких температур кулоновская часть свободной энергии может быть записана в форме следующего ряда:

$$f_{Coul} = -\frac{k_B T}{12} \kappa^3 + \pi^{3/2} n_e \sum_i n_i \beta e^2 e_i^2 \lambda_{ei} (1 + \beta e e_i \kappa) - \\ - k_B T \sum_{ab} n_a n_b B_{ab} + \dots, \quad (3.2.10)$$

$$\lambda_{ei} = \frac{\hbar}{(2m_{ei} k_B T)^{1/2}}. \quad (3.2.11)$$

Суммирование по a и b осуществляется для всех частиц, тогда как суммирование по i — только для ионов. Величина, обратная дебаевскому радиусу экранирования равна:

$$\kappa^2 = 4\pi\beta\mu_k, \quad \mu_k = \sum n_a e_a^k. \quad (3.2.12)$$

Второй вириальный коэффициент известен с точностью до соответствующего порядка по плотности:

$$\begin{aligned}
 B_{ab} = & \frac{\pi}{3}(\beta e_a e_b)^3 \left[1 + \mu_{ab} + \frac{5}{48}\mu_{ab}^2 - \frac{1}{24}(\kappa\lambda_{ab})^2 + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4}\pi^3 \mu_{\kappa} e_a e_b \beta^3 - 4\pi(\ln 2)\beta^3 e_a \mu_4 \right] \ln(\kappa\lambda_{ab}) + \\
 & + 2\pi(1 + \mu_{ab})\lambda_{ab} [\text{sign}(e_a e_b)Q(-|\xi_{ab}|) + D_{ab}E(\xi_{ab})] - \\
 & - A_0(\beta e_a e_b)^4 \kappa - A_1\beta^5 e_a^4 e_b^3 \mu_3 \kappa^{-1} - A_2\beta^6 \mu_3^2 \kappa^{-3} + O(n^3),
 \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

где

$$\mu_{ab} = \beta e_a e_b \kappa, \quad D_{ab} = \frac{(-1)^{2s_a} \delta_{ab}}{2s_a + 1}, \quad (3.2.14)$$

$$A_0 = 0,7459, \quad A_1 = 10,72, \quad A_2 = 10,13.$$

Вириальные функции Q и E представлены в виде бесконечных рядов, расчет которых можно посмотреть в других источниках (EBELING, 1969; EBELING et al., 1970, 1976a). Формально их можно описать следующим образом:

$$Q(x) = \sum_{n=1}^{\infty} q_n x^n, \quad E(x) = \sum_{n=0}^{\infty} e_n x^n, \quad (3.2.15)$$

$$\begin{aligned}
 q_1 = & -\frac{1}{6}, \quad q_2 = -\frac{\pi^{1/2}}{8}, \quad q_3 = -\frac{1}{6}\left(\frac{1}{2}C_E + \ln 3 - \frac{1}{2}\right), \\
 q_n = & \frac{\pi^{1/2}\xi(n-2)2^{-n}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}, \quad \text{если } n \geq 4;
 \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

$$\begin{aligned}
 e_0 = & \frac{\pi^{1/2}}{4}, \quad e_1 = \frac{1}{2}, \quad e_2 = \frac{\pi^{1/2}}{4} \ln 2, \quad e_3 = \frac{\pi^2}{72}, \\
 e_n = & \frac{\pi^{1/2}(1-2^{2-n})\xi(n-1)2^{-n}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}, \quad \text{если } n \geq 4.
 \end{aligned}$$

Полное химическое описание, включающее закон действующих масс, можно получить с помощью уравнений (3.2.1)–(3.2.16) путем минимизации свободной энергии и введением ограничения, связанного с сохранением числа частиц:

$$f = \min, \quad n_a = n_a^* + \sum_s \sum_b n_s^{(ab)} = \text{const.} \quad (3.2.17)$$

Итак, мы дали лишь общую картину. На практике для расчета свободной энергии могут быть использованы аппроксимации Якоби–Паде, которые оказываются справедливыми и для более высоких значений плотностей. Рассмотрим их в следующем разделе.

3.3. Аппроксимации Якоби–Паде

Бесконечные ряды, описанные в разделах 3.1 и 3.2, не подходят для практического расчета термодинамических функций из-за плохой сходимости. Еще в прошлом веке математик из Берлинского университета Якоби сделал ряд открытий в области аппроксимации функций. Впоследствии его теорию развил Паде в своей диссертации (1892). Аппроксимации Якоби–Паде основаны на построении рациональных функций, полностью описывающих аналитическое поведение исследуемой функции.

Построим приближенное выражение для плотности свободной энергии, обусловленной кулоновским взаимодействием, которое было бы справедливым применительно к многокомпонентной плазме, содержащей многозарядные ионы (EBELING et al., 1987; EBELING, 1989a, 1989b, 1990a; FÖRSTER and KANLBAUM, 1990; KAGHLBAUM and FÖRSTER, 1990). Мы используем свободную энергию в виде суммы вкладов:

$$f_{Coul} = f_e + f_i + f_{ie}, \quad (3.3.1)$$

представляющих электронный газ, газ ионов и вклад электрон-ионного взаимодействия.

В дальнейшем мы будем использовать единицу энергии – ридберг.

Часть свободной энергии, обусловленную вкладом электронов, представим в виде (EBELING and RICHERT, 1985a,b):

$$f_e = -n_e \frac{f_0 \bar{n}^{1/2} + f_3 \bar{n} + f_2 \bar{n}^2 \varepsilon(r_s)}{1 + f_1 \bar{n}^{1/2} + f_2 \bar{n}^2}. \quad (3.3.2)$$

Коэффициенты в данном уравнении идентичны тем, которые принимались ранее, за исключением коэффициента f_1 , равного:

$$f_1 = \frac{2^{1/2}}{8f_0} \left[1 + \frac{2\tau}{\pi^{1/2}} E_2 \left(- \left(\frac{2}{\tau} \right)^{1/2} \right) \right], \quad (3.3.3)$$

$$E_2(x) = \frac{\pi^{1/2} \ln 2}{4} x^2 + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{\pi^{1/2} (1 - 2^{2-n}) \xi(n-1)}{\Gamma(1 + \frac{n}{2})} \left(\frac{x}{2} \right)^n. \quad (3.3.4)$$

Обращаем ваше внимание на то, что почти во всех наших ранних изданиях мы оставляли лишь первый член бесконечного ряда (3.3.4). На практике при $\tau \ll 1$ (τ — температура в ридбергах) можно использовать следующую приближенную формулу:

$$f_i = \frac{\frac{2^{1/2}}{8} + \frac{1}{4} \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{1/2} - \frac{\tau}{8 \cdot 2^{1/2}}}{f_0}.$$

Что касается вклада ионов, построение аппроксимации в этом случае более сложно. Практика показывает, что ранняя формула Якоби–Паде (EBELING et al., 1987; EBELING, 1989a) ведет себя недостаточно хорошо при некоторых значениях плотности и температуры, а также в случае большой асимметрии зарядов. Поэтому мы приводим здесь новую модификацию формулы, обобщая предыдущий опыт с водородоподобной плазмой (EBELING and RICHERT, 1985a,b; EBELING et al., 1988; а также раздел 4.2), мы теперь предлагаем ее новый вариант:

$$f_{ie} = -\tau n_+ \frac{Q_0 \tilde{n}^{1/2} + Q_2 \tilde{n}^{3/2} e_2(\hat{n}, \tau_s, \tau)}{1 + Q_1 (\tilde{n}\tau)^{1/2} + Q_2 \tilde{n}^{3/2} + Q_4 \tilde{n}^{1/2} \ln \left(1 + \frac{Q_5}{\tilde{n}^{1/2}}\right)}, \quad (3.3.5)$$

$$f_i = -\tau n_+ \frac{q_0 \tilde{n}^{1/2} + q_2 \hat{n}^{3/2} c_1(\hat{n})}{1 + q_1 (\tilde{n}\tau)^{1/2} + q_2 \tilde{n}^{3/2}}. \quad (3.3.6)$$

В новой модификации формулы Якоби–Паде фигурируют следующие параметры:

$$\begin{aligned} \bar{n} &= n_e \Lambda_e^3, \quad \tilde{n} = n_+ \beta^3 \varepsilon^6, \quad \hat{n} = \tilde{n} \langle z \rangle \langle z^{5/3} \rangle^3, \quad n_+ = \sum_i n_i, \\ \xi &= \frac{n_e}{n_+}, \quad \xi_i = \frac{n_i}{n_+}, \quad \gamma_i = \frac{m_e}{m_i}, \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n_e a_0^3} \right)^{1/3}, \\ \xi_{ab} &= -\frac{2z_a z_b}{[\tau(\gamma_a + \gamma_b)]^{1/2}}, \quad C_E \approx 0,577216, \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

среднее от произвольной функции заряда определяется как:

$$\langle f(z) \rangle = \sum_i f(z_i) \xi_i. \quad (3.3.8)$$

Теперь определим коэффициенты:

$$Q_0 = \frac{2\pi^{1/2}}{3} \left[(\xi + \langle z^2 \rangle)^{3/2} - \xi^{3/2} - \langle z^2 \rangle^{3/2} \right],$$

$$q_0 = \frac{2\pi^{1/2}}{3} \langle z^2 \rangle^{3/2},$$

$$Q_1 Q_0 = \frac{\pi^{3/2}}{4} \xi \langle z^2 \rangle - \frac{2\pi}{\tau^{1/2}} \sum_a \sum_b \xi_a \xi_b z_a^{3.3} z_b^{3.3} \left(\frac{Q_3(-|\xi_{ab}|)}{|\xi_{ab}|^3} - \frac{1}{6} \ln |3\xi_{ab}| - \frac{C_E}{3} - \frac{11}{36} \right), \quad (3.3.9)$$

$$q_1 q_0 = \frac{\pi^{3/2}}{8} \sum_i \sum_j \xi_i \xi_j z_i^2 z_j^2 (\gamma_i + \gamma_j)^{1/2} - 2\pi\tau \sum_i \xi_i^2 \frac{(-1)^{2s_i}}{2s_i + 1} \times \\ \times \left(\frac{\gamma_i}{2} \right)^{3/2} E_2 \left[-z_i^2 \left(\frac{2}{\gamma_i \tau} \right)^{1/2} \right],$$

$$Q_2 = 1, \quad q_2 = 1000,$$

$$Q_3 Q_0 = 0,5236 (\langle z^3 \rangle - \xi) \{ 4 \langle z^3 \ln z \rangle + (\langle z^3 \rangle - \xi) \times \\ \times \ln [29,09 (\langle z^2 \rangle + \xi)] \},$$

$$Q_4 Q_0 = 1,0472 (\langle z^3 \rangle - \xi)^2, \quad Q_5 = \exp \left(-\frac{Q_3}{Q_4} \right),$$

$$Q_3(x) = - \left(\frac{C_E}{2} + \ln 3 - \frac{1}{2} \right) \frac{x^3}{6} + \sum_{n=4}^{\infty} \frac{\pi^{1/2} \xi (n-2)}{\Gamma(1 + \frac{n}{2})} \left(\frac{x}{2} \right)^n.$$

Заметим, что суммирование по a и b распространяется на все частицы, а суммирование по i и j — только на ионы (положительно заряженные) частиц. Поскольку иметь дело с бесконечными рядами достаточно сложно, при низких температурах $\tau \ll 1$ можно воспользоваться следующими простыми асимптотическими представлениями:

$$Q_1 Q_0 = \frac{\pi^{3/2}}{2} \xi \langle z^2 \rangle - q_1 q_0, \quad (3.3.10)$$

$$q_1 q_0 = \frac{\pi^{3/2}}{8} \sum_i \sum_j \xi_i \xi_j z_i^2 z_j^2 (\gamma_i + \gamma_j)^{1/2}. \quad (3.3.11)$$

Осталось описать две функции, определяющие предел сильной неидеальности. Согласно ранним работам (EBELING and RICHERT, 1985a, 1985b, EBELING et al., 1988), которые включают численные результаты Хансена, Де Витта и других авторов (DE WITT, 1976; HUBBARD and DE WITT, 1985), основной вклад определим как:

$$e_1(x) = 1,4474x^{1/3} - 4,2944x^{1/12} + 0,6712x^{-1/12} + (0,2726 \ln x + 2,983). \quad (3.3.12)$$

Поправки на экранирование даются следующим выражением:

$$e_2(x, y, z) = \frac{0,8511yx^{1/12}}{(1+0,3135x^{-1/12})(1+1,137yz^{1/2})} + \frac{yx^{1/3}(0,0726+0,0161y)}{1+0,0887y^2}. \quad (3.3.13)$$

Еще раз обращаем ваше внимание, что аппроксимация Якоби–Паде (уравнения (3.3.5)–(3.3.6)) при высоких значениях \hat{n} соответствует одножидкостной модели, разработанной Розенфельдом (Rosenfeld, 1980).

В случае водородоподобной плазме формулы (3.3.2)–(3.3.13) сводятся к описанным ранее (EBELING et al., 1988). В этом случае $Q_3 = Q_1 = 0$, т.е. отсутствует логарифмическая составляющая в знаменателе уравнения (3.3.5). С другой стороны, использование логарифмического члена гарантирует тот факт, что вклад, обусловленный зарядовой асимметрией, не будет значительно увеличиваться с изменением плотности. По нескольким причинам, эти члены должны давать важный вклад при низких плотностях, а при высоких не должны играть существенной роли, поскольку в этом случае доминирующими оказываются \hat{n} -составляющие. Возможно, приемлемым компромиссом между этими требованиями может служить использование конструкций, даваемых уравнениями (3.3.5)–(3.3.6). Это также гарантирует, что ни один член знаменателя не будет отрицательным. При малых плотностях уравнения (3.3.2)–(3.3.11) полностью соответствуют результатам квантово-статистических разложений по плотности, которые мы рассматривали в разделе 3.2. При высоких плотностях результаты расчета вычислений с использованием уравнений (3.3.2)–(3.3.11) совпадают с результатами, полученными Геллманом и Бракнером или Хансеном, Де Виттом.

Эффект смещения зарядов мы учитывали здесь на основе простой одножидкостной модели (ROSENFELD, 1980, 1982). Также можно было бы применить модель линейной смеси (ROSENFELD, 1980), которой мы отдавали предпочтение в ранних работах (EBELING, 1989a; EBELING and LEHMANN, 1989). В разделе 3.4 мы это продемонстрируем. В некоторых последних статьях (ICHMARU et al., 1988; CHABRIER and ASHCROFT, 1990) даже доказывается превосходство модели линейной смеси.

Для сравнения с другими работами кратко рассмотрим некулоновские вклады. Согласно той методике, которую мы применяли ранее, вклад твердых сфер просто прибавляется ко вкладу притяжения ван дер Ваальса:

$$f_{vdW} = k_B T \sum_{a,b} n_a n_b A_{ab}, \quad (3.3.14)$$

где A_{ab} — постоянная ван дер Ваальса (EBELING et al., 1988). Вклад твердых сфер равен:

$$f_{hc} = \frac{1}{2} k_B T \sum_{a,b} n_a n_b \frac{4\pi}{3} (R_a + R_b)^3, \quad (3.3.15)$$

где R_a — радиусы соответствующих частиц. При более высоких плотностях лучше использовать аппроксимации Мансури и др. (MANSOORI et al., 1971) (см. раздел 3.1).

Ради интереса сравним нашу формулу с другим подходом (HUMMER and MIHALAS, 1988; MIHALAS et al., 1988; DAPPEN et al., 1988), у которого много общего с приближением Гюнделя (GÜNDEL, 1970, 1971). Для простоты рассмотрим случай, при котором существует лишь одно связанное состояние. Тогда уравнение, которое вывели Дашпен, Хаммер и Михалас, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} f = & \sum_i f_{id}^{(i)} + f_{id}^{(e)} + n_k E_k + \tau n_k \ln \frac{n_k \Lambda_k^3}{g_k} + \tau n_k \frac{4\pi}{3} \times \\ & \times \left[\sum_i n_i (R_n + R_i)^3 + 16 \left(\frac{(z_i + 1)^{1/2} e^2}{K_k^{1/2} \chi_k} \right)^3 n_i \langle z^{3/2} \rangle \right] - \\ & - \tau n_+ \frac{2\pi^{1/2}}{3} \tilde{n}^{1/2} [\xi + \langle z^2 \rangle]^{3/2} \tau(x), \end{aligned} \quad (3.3.16)$$

где K_k — константа, близкая к единице, χ_k — энергия ионизации связанного состояния и

$$\tau(x) = 1 - \frac{3}{4}x + \frac{3}{5}x^2 - \dots \quad (3.3.17)$$

Сравнение показывает, что некоторые их составляющие довольно близки, например, вклады твердых сфер (уравнения (3.3.15) и (3.3.16)), а также закон Дебая, включающий первые квантовые поправки в уравнении (3.3.16), аналогичны уравнениям (3.3.2)–(3.3.11). Однако член $\langle z^{3/2} \rangle$ в уравнении (3.3.16) не эквивалентен нашей формуле. С другой стороны, наши уравнения содержат некоторые другие кулоновские составляющие.

Слегка модифицированный вариант аппроксимаций Якоби-Паде (уравнения (3.3.1) (3.3.13)), в котором учитывается вклад кулоновских взаимодействий в плотности свободной энергии был предложен в работе (KANIBAUМ and FÖRSTER, 1990) и использован в работе Фёрстера и др. (FÖRSTER et al., 1990, 1991a-c). Он конструируется с использованием классических параметров неидеальности Γ_i и Γ_e :

$$\Gamma_i = \frac{\varepsilon^2}{k_B T} \left(\frac{4\pi n_i}{3} \right)^{1/3} \quad \text{и} \quad (3.3.18)$$

$$\Gamma_e = \frac{\varepsilon^2}{k_B T} \left(\frac{4\pi n_e}{3} \right)^{1/3}.$$

В модифицированном варианте плотность свободной энергии также складывается из трех составляющих:

$$f_{\text{Coul}} = f_e + f_{ie} + f_i. \quad (3.3.19)$$

Вклад электронов равен:

$$f_e = -\tau n_e \frac{f_0'' \Gamma_e^{3/2} + f_6 \Gamma_e^3 + f_2'' \Gamma_e^6 \varepsilon(r_s)/\tau}{1 + f_1'' \Gamma_e^{3/2} + f_2'' \Gamma_e^6}, \quad (3.3.20)$$

составляющая, обусловленная взаимодействием электронов и ионов, равна:

$$f_{ie} = -\tau n_+ \frac{f_0' \Gamma_i^{3/2} + f_2' \Gamma_i^{9/2} e_2}{1 + f_1' \Gamma_i^{3/2} + f_2' \Gamma_e^{9/2} + 2f_4 \Gamma_i^{3/2} \ln \left(1 + \left(\frac{f_5}{\Gamma_i^3} \right)^{1/2} \right)}, \quad (3.3.21)$$

и вклад ионов равен:

$$f_i = -\tau n_+ \frac{f_0 \Gamma_i^{3/2} + f_2 \Gamma_i^{9/2} e_1}{1 + f_1 \Gamma_i^{3/2} + f_2 \Gamma_i^{9/2}}. \quad (3.3.22)$$

При низких плотностях и/или высоких температурах данная формула Якоби-Паде соответствует закону Дебая с квантовыми поправками. Коэффициенты для закона Дебая (с нижним индексом 0), зарядово-симметричные корреляционные составляющие (с нижним индексом 1), зарядово-асимметричные корреляционные составляющие (с нижними индексами 3-5),

а также составляющая Хартри Фока, обусловленная электронным обменом (с нижним индексом 6), равны:

$$\begin{aligned}
 f_0 &= \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} \langle z^2 \rangle^{3/2}, \\
 f'_0 &= \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} (\langle z^2 \rangle + \xi)^{3/2} - \langle z^2 \rangle^{3/2} - \xi^{3/2}, \\
 f''_0 &= \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}, \\
 f_1 &= \frac{3}{32} (6\pi\gamma_i\tau \langle z^2 \rangle)^{1/2}, \\
 f'_1 &= \frac{\left(\frac{3}{8}\right) (\pi\tau)^{1/2} \langle z^2 \rangle \xi - f_0 f_1}{f'_0}, \\
 f''_1 &= \frac{f_6 - \frac{3}{32} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \tau^{3/2}}{f''_0}, \\
 f_3 &= \frac{\left(\frac{\pi}{48}\right)^{1/2} (\langle z^3 \rangle - \xi) (4\langle z^3 \ln z \rangle + (\langle z^3 \rangle - \xi) \ln\{C(\langle z^2 \rangle + \xi)\})}{f'_0}, \\
 f_4 &= \frac{(\langle z^3 \rangle - \xi)^2}{8f'_0}, \\
 f_5 &= \left(\frac{4\pi}{3}\right) \exp\left(-\frac{\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} f_3}{f_4}\right), \\
 f_6 &= \left(\frac{3}{16}\right) \tau,
 \end{aligned} \tag{3.3.23}$$

где

$$C = 4\pi \exp\left(2(2C_E + \ln 3 - \frac{11}{6})\right). \tag{3.3.24}$$

Заметим, что хотя при $\Gamma_i, \Gamma_e \ll 1$ значения остальных корреляционных составляющих известны для любой температуры, они даны в своем низкотемпературном пределе. Мы уже упоминали, что с повышением температуры ионы и электроны ведут себя по-разному. Ионы образуют классическую подсистему сильно взаимодействующих частиц, подсистема имеет решетчатую структуру, экранированную сильно вырожденным электронным газом. Таким образом, функция f_{Coul} сходится к результату моделирования

межионного или электрон-ионного взаимодействия методом Монте-Карло и к результату 0 К — вычислениям электронной части, обозначенным ϵ_1 , ϵ_2 и $\epsilon(r_s)$, соответственно (см. выше). Переход формулы Якоби–Паде к этому предельному случаю обеспечивается коэффициентами:

$$\begin{aligned} f_2 &= C_1 \left(\left(\frac{3}{4\pi} \right) \langle z \rangle \langle z^{5/3} \rangle^3 \right)^{3/2}, & C_1 &\approx 1000, \\ f'_2 &= C_2 \left(\left(\frac{3}{4} \right) \pi^{1/2} \tau^{3/2} \right)^{3/2}, & C_2 &\approx 1, \\ f''_2 &= C_3 \left(\frac{9}{16} \right) \pi \tau^3, & C_3 &\approx 3, \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

где значения констант C_1 , C_2 и C_3 определены на основе сравнения с численными данными.

Чтобы окончательно убедиться в том, насколько аппроксимация Якоби–Паде является качественной, необходимо проверить ее достоверность на высокоточных данных, полученных методами Монте-Карло или молекулярными расчетами молекулярной динамики. На сегодняшний день мы располагаем ограниченным количеством данных по водороду (SEPERLEY and ADLDER, 1987), поэтому более точное сравнение можно будет провести лишь в будущем. Открытым является также вопрос, предпочтительнее ли аппроксимация Якоби–Паде в сравнении с другими методиками (PERROT and DHARMA-WARDANA, 1984; TANAKA and ICHIMARU, 1985; SAUMON and CHABRIER, 1989). Эбелинг и Леманн (EBELING and LEHMANN, 1988) на примере электронного газа провели тщательный сравнительный анализ и пришли к выводу, что в целом аппроксимация Якоби–Паде приводит к достаточно хорошим результатам, но на некоторых участках плоскости плотность-температура погрешность может достигать 20%. Поскольку данная методика сводится к построению довольно простой аналитической формулы, она требует большой осторожности и независимых тестов.

3.4. Средне-сферическое приближение

Не только аппроксимации Якоби–Паде, описанные в предыдущем разделе, позволяют построить универсальную формулу, справедливую для широкого диапазона температур и плотностей. К тому же у данной формулы есть существенный для практических расчетов недостаток — в ней не учитывается влияние ближкодействующего отталкивания на вклад кулоновских взаимодействий. Уравнения, приведенные в разделах 3.2 и 3.3, выводились с учетом допущения, что заряженные частицы — это точки. На самом деле

все ионы, за исключением непосредственно ядер, обладают определенным конечным радиусом. Поскольку пока не существует строгой квантово-статистической теории твердых заряженных сфер, приведем лишь общие концепции относительно того, как можно учесть влияние разнородных заряженных твердых сфер. Далее мы опишем первый элементарный подход.

Как и в разделе 3.3, начнем с того, что представим плотность свободной энергии, обусловленную кулоновским взаимодействием, в виде суммы трех составляющих: вклада электронов, ионов и смешанного вклада:

$$f_{Cout} = f_e + f_i + f_{ei}. \quad (3.4.1)$$

Естественно предположить, что конечный радиус ионов повлияет лишь на вклады f_i и f_{ei} . Предположим, что ион сорта j имеет радиус твердой сферы R_j . Тогда наименьшим возможным расстоянием между ионами будет $R_{jk} = R_k + R_j$. Для начала сравним два случая: классический и квантовый. Если заряженные частицы рассматривать в качестве твердых сфер с минимальным расстоянием R_{ab} между частицами a и b , так называемый кольцевой вклад будет примерно равен (FALKENHAGEN, 1971):

$$f_R = -\frac{4\pi\epsilon^4}{3\kappa k_B T} \sum_{ab} n_a n_b z_a^2 z_b^2 \left\{ 1 - \frac{3}{4}\kappa R_{ab} + O(\kappa^2) \right\}. \quad (3.4.2)$$

Здесь суммирование производится для всех частиц, включая электроны с $z_e = -1$. Чтобы вывести соответствующую формулу для квантово-статистической системы, необходимо ограничить функцию Q (уравнение (3.2.15) в разделе 3.2) параметром e^4 :

$$f_R = -\frac{4\pi\epsilon^4}{3\kappa k_B T} \sum_{ab} n_a n_b z_a^2 z_b^2 \left\{ 1 - \frac{3}{16}\pi^{1/2}\kappa\lambda_{ab} + O(\kappa^2) \right\}. \quad (3.4.3)$$

Сравнение показывает, что величина

$$R_{ab}^* = \frac{1}{4}\pi^{1/2}\lambda_{ab} \quad (3.4.4)$$

является эффективным минимальным расстоянием. Для пар электрон-электрон и электрон-ион оно равно:

$$R_{ee}^* = \frac{2^{1/2}}{8}\Lambda_e; \quad R_{ei}^* = \frac{1}{8}\Lambda_e, \quad (3.4.5)$$

где Λ_e — дебройлевская длина волны электронов.

На сегодняшний день не существует последовательной квантово-статистической теории частиц с конечным радиусом твердых сфер. Тем не менее, не так давно было выдвинуто предположение, согласно которому в качестве приемлемого приближения для пары электрон-ион можно рассматривать сумму классического и квантового радиусов. Данный принцип соответствует выражению (EBELING et al., 1979):

$$R_{ej}^* = R_j + \frac{1}{8} \Lambda_e. \quad (3.4.6)$$

Здесь R_j — радиус иона. Согласно такому подходу было получено новое уравнение для функции Q_1 , фигурирующей в формуле для f_{ie} (см. уравнения (3.3.9)–(3.3.10)):

$$Q_1^* Q_0 = Q_1 Q_0 + 2\pi \left(\frac{k_B T}{\varepsilon^2} \right) \tau^{-1/2} \langle z_j^2 \rangle \langle z_j^2 R_j \rangle. \quad (3.4.7)$$

Пренебрегая незначительными квантовыми поправками на взаимодействие заряженных сфер, ионную подсистему будем рассматривать как смесь из N_j' точечных зарядов (с одним штрихом) и N_j'' классических заряженных сфер (с двумя штрихами). Как показали несколько исследователей, модель линейной смеси позволяет получить достаточно хорошее приближение (ROSENFELD, 1980; ICHIMARU et al., 1987, 1988; ICHIMARU, 1990). Поэтому применительно к ионным составляющим мы применим простые правила линейной смеси:

$$f_i = f_i' + f_i''. \quad (3.4.8)$$

В данном выражении первое слагаемое (с одним штрихом) соответствует вкладу точечных зарядов, которое согласно теории модели линейной смеси (EBELING, 1989a) дается формулой:

$$f_i' = -\tau \sum_j n_j' \frac{q_0 \tilde{n}^{1/2} + q_2 \tilde{n}^{3/2} e_1 (\tilde{n} z_j^5 \langle z_k \rangle)}{1 + q_1 (\tilde{n} \tau)^{1/2} + q_2 \tilde{n}^{3/2}}. \quad (3.4.9)$$

Все коэффициенты в данном уравнении соответствуют тем, которые были описаны в разделе 3.3. Вклад заряженных твердых сфер можно представить

средне-сферическим приближением:

$$f_i'' = -\varepsilon^2 \sum_j'' n_j'' \left\{ \frac{K(z_j^*)^3}{1 + Kd_j} + \frac{\pi z_j^* d_j}{2\Delta(1 + Kd_j)} P_n + \frac{\pi n_e z_j d_j^2}{2} - \frac{\pi^2 n_e^2 d_j^5}{30} - \frac{K \left(z_j^* - \frac{\pi}{2\Delta} d_j^2 P_n \right)^2}{3(1 + Kd_j)^2} \right\} \quad (3.4.10)$$

Все переменные, фигурирующие в данном уравнении, были описаны в разделе 3.1. Именно так рассчитывается плотность свободной энергии классической смеси заряженных твердых сфер диаметром $d_j = 2R_j$, находящихся в электронной среде.

Более подробное описание средне-сферических приближений, а также сравнительный анализ выражений, приведенных в разделах 3.3 и 3.4, мы оставляем для будущей работы. Средне-сферические приближения лучше применять для плазмы, в которой большая часть ионов характеризуется конечным радиусом, например, для щелочной плазмы или плазмы инертных газов. Четвертая глава настоящей книги посвящена плазме легких элементов, в которой преобладают точечные ионы, поэтому в рамках четвертой главы мы будем преимущественно использовать аппроксимацию Якоби-Паддс, которая была описана в разделе 3.3.

3.5. Сдвиги энергетических уровней и ионизационная щель

Для изолированных систем, образованных парой заряженных частиц, уровни связанного состояния представляются собственными значениями соответствующего уравнения Шредингера. К примеру, пара частиц, состоящая из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженного электрона, соответствует точно решаемой задаче об атоме водорода; такая задача решается однозначно, а значения уровней содержатся в уравнении Бора. Если связанная пара находится внутри плазмы, задача усложняется, поскольку на квантовые состояния пары оказывает влияние окружающая плазма (KRAFFT et al., 1986).

Наличие окружающей плазмы приводит к четырем важнейшим физическим явлениям:

(I) И электрон, и ядро находятся в потенциальной яме, возникающей вследствие поляризации плазмы. В результате этого у системы появляется так называемый собственно-энергетический эффект.

(II) Плазма экранирует взаимодействие кулоновских сил, поэтому здесь справедливы законы взаимодействия Дебая и возникают соответствующие сдвиги, которые мы в дальнейшем будем называть дебаевскими сдвигами.

(III) Электрон, вращаясь вокруг ядра, не может занять ни одно состояние из-за некоторых ограничений, накладываемых принципом Паули. Если состояние уже занято электронами плазмы, оно не рассматривается в процессах взаимодействия и рассеяния, что приводит к так называемым сдвигам Паули. Особенно важными они оказываются для возбужденных состояний.

(IV) В результате того, что электрон в составе связанного состояния сталкивается с окружающей плазмой, продолжительность жизни связанных состояний в плазме ограничена.

Чтобы учесть все эти явления, необходимо обобщить проблему собственных значений уравнения Шредингера, следуя методике Килиманна и др. (KILIMANN et al., 1977).

Рассмотрим невырожденную плазму, состоящую из электронов и разнозарядных ионов. Введем понятие плотности числа частиц свободных электронов n_e , однозарядных ионов n_1 , двухзарядных ионов n_2 и т. д., а также плотности числа ядер n_z . Запишем уравнение баланса:

$$n = \sum_{z=0}^{\infty} n_z, \quad (3.5.1)$$

где n — плотность числа тяжелых частиц (общая плотность числа ядер). Согласно условию электронейтральности:

$$n_e = \sum_{z=0}^{\infty} z n_z. \quad (3.5.2)$$

Ключевой является величина, обратная дебаевскому радиусу экранирования:

$$r_D^{-1} = \kappa - \left\{ 4\pi\beta \left[n_e + \sum_{z=1}^{\infty} n_z z^2 \right] \epsilon^2 \right\}^{1/2}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (3.5.3)$$

Процессы ионизации и возбуждения частиц в плазме тесно связаны с разностью энергий между уровнем основного состояния иона или атома и непрерывным спектром, а также с разностью энергий уровней различных связанных состояний. Рассмотрим простой метод расчета сдвигов энергетических уровней и соответствующих им эффективных энергий ионизации в плазме, содержащей многозарядные ионы. Основным физическим соотношением для расчета энергетических уровней в плазме является уравнение Бете-Солпитера (KILIMANN et al., 1977; ZIMMERMANN et al., 1978; KRAEFT et al., 1986):

$$\begin{aligned} & [\varepsilon_e(1) + \varepsilon_i(2) - \tilde{E}] \psi_{ie}(p_1, p_2, \tilde{E}) - \sum_q V_{ie}(q) \psi_{ie}(p_q - q, p_2 + q, \tilde{E}) = \\ & = \sum_q V_{ie} \{ [N_{ie} - 1] \psi'_{ie} - [N'_{ie} - 1] \psi_{ie} \} + \\ & + \sum_q [V_{ie}^{eff} - V_{ie}] \{ N_{ie} \psi'_{ie} - N'_{ie} \psi_{ie} \}, \end{aligned} \tag{3.5.4}$$

где ψ_{ie} — волновая функция, V_{ie} — чисто кулоновский потенциал, V_{ie}^{eff} — эффективный потенциал, N_{ie} — число заполнения. Штрихом (') обозначены параметры после сдвига. Правая часть уравнения (3.5.4) содержит плазменные поправки из-за наличия таких вкладов, как:

- (I) динамическая собственно-энергетическая часть;
- (II) обменная собственно-энергетическая часть;
- (III) динамически экранированное кулоновское взаимодействие;
- (IV) заполнение фазового пространства.

Функции ε_e и ε_i означают кинетические энергии:

$$\varepsilon_e = \frac{p_1^2}{2m_e}, \quad \varepsilon_i = \frac{p_2^2}{2m_i}. \tag{3.5.5}$$

Рассматривая правую часть уравнения в качестве поправки, получаем статическое дебаевское приближение без учета эффектов Паули по теории возмущений:

$$\tilde{E}_k^{z-1} = E_k^{z-1} + \Delta_e + \Delta_z + \Delta_k^{z-1}. \tag{3.5.6}$$

Сдвиг энергетического уровня складывается из трех основных составляющих: собственно-энергетической части электронов Δ_e , ионов Δ_i и дебаевского сдвига:

$$\Delta_k^z = \langle (V_{ei}^{eff} - V_{ei}) \rangle_k. \tag{3.5.7}$$

Собственно-энергетические части примерно равны:

$$\Delta_c \approx -\frac{1}{2}\varepsilon^2 \kappa; \quad \Delta_z = -\frac{1}{2}z^2\varepsilon^2 \kappa. \quad (3.5.8)$$

Чтобы более точно представить собственно-энергетические части с помощью аппроксимаций Якоби-Паде для химических потенциалов, необходимо вычислить производные свободной энергии, уравнения которой приводились в разделах 3.3 и 3.4. Дебаевский сдвиг k -го энергетического уровня вычисляется как математическое ожидание разности между кулоновским потенциалом и дебаевским потенциалом в квантовом состоянии k :

$$\begin{aligned} \Delta_k^z &= z\varepsilon^2 \langle (r^{-1} - r^{-1} \exp(-\kappa r)) \rangle_k = \\ &= z\varepsilon^2 \begin{cases} x - \frac{1}{2}\kappa^2 \langle r \rangle_k + \frac{1}{6}\kappa^3 \langle r^2 \rangle_k + \dots, & \text{если } \kappa a_B \ll 1 \\ \langle r^{-1} \rangle_k, & \text{если } \kappa a_B \gg 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.5.9)$$

где $\langle r^n \rangle_k$ — математические ожидания r^n для траектории k , соответствующей собственному состоянию k .

Из расчетов следует, что в приближении нулевого порядка для основного состояния иона, несущего $(z - 1)$ протоновых зарядов

$$\tilde{E}_{1s}^{z-1} = E_{1s}^{z-1} - \frac{1}{2}(z-1)^2\varepsilon^2 \kappa. \quad (3.5.10)$$

Видно, что для однозарядных ионов переменные сдвиги основного состояния взаимно уничтожаются. Такая ситуация соответствует расчетам методом функций Грина, а также расчетам Кудрина (КУДРИН, 1974). Таким образом, сделанное нами допущение не приводит к значительным погрешностям. Теперь рассмотрим возбужденные состояния. В этом случае значенные параметра

$$\kappa \langle r^n \rangle_k \quad (3.5.11)$$

достаточно велико, поэтому им нельзя пренебречь. Воспользуемся аппроксимацией Якоби-Паде (EBELING and KILIMANN, 1989):

$$\Delta_k^{z-1} = z\varepsilon^2 \kappa \frac{1 + a_k^2 \kappa}{1 + b_k^2 \kappa + c_k^2 \kappa^2}, \quad (3.5.12)$$

где коэффициенты даются выражениями:

$$a_k^z = \frac{\left\{ \frac{1}{4} \langle r \rangle_k^2 - \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle_k \right\} \langle r^{-1} \rangle_k}{D}, \quad (3.5.13)$$

$$b_k^z = \frac{1}{2} \langle r \rangle_k + a_k^z, \quad (3.5.14)$$

$$c_k^z = \frac{a_k^z}{\langle r^{-1} \rangle_k}, \quad (3.5.15)$$

$$D = 1 - \frac{1}{2} \langle r \rangle_k \langle r^{-1} \rangle_k. \quad (3.5.16)$$

Формула Якоби–Паде (уравнения (3.5.12)–(3.5.16)), основанная на теории возмущений, переоценивает сдвиги при высоких плотностях на 100%, что говорит о недостатке подхода, основанного на теории возмущений. Самым легким способом устранения такой очевидной ошибки в теории возмущений служит уменьшение вдвое значения коэффициента высшего порядка, т. е. скорректированный коэффициент будет равен:

$$c_k^z = \frac{a_k^z}{2 \langle r^{-1} \rangle_k}. \quad (3.5.15a)$$

На основе этих формул, а также оригинального выражения (3.5.7) можно сделать вывод, что для больших квантовых чисел дебаевским сдвигом можно пренебречь. Следовательно, мы получаем для предела континуума:

$$\tilde{P}_\infty^{z-1} = \Delta_e + \Delta_z \approx -\frac{1}{2} \varepsilon^2 (1 + z^2) \kappa. \quad (3.5.17)$$

В отличие от уровня основного состояния, граница непрерывного спектра напрямую зависит от плотности, даже для водородоподобных ионов (когда $z = 1$). Эффективная энергия ионизации равняется разности между энергией границы континуума и энергией основного состояния $k = 1$ (энергетическая щель). С учетом вышеописанных уравнений эта величина будет равна:

$$I_1^{z-1} = |E_1^{z-1}| - \Delta_1^z. \quad (3.5.18)$$

Видим, что многозарядные ионы ионизируются при более низких плотностях, чем однозарядные ионы (имеется в виду плотность числа ядер) (EBELING, 1989a).

Энергия ионизации иона, находящегося в k -ом квантовом состоянии, в том же приближении выражается как

$$I_k^{z-1} = |E_k^{z-1}| - \Delta_k^{z-1}. \quad (3.5.19)$$

Отсюда видно, что высшие уровни исчезают при более низких плотностях, чем основное состояние.

Заметим, что эффективная энергия ионизация является очень важным физическим параметром, поскольку от него зависит много других физических величин. В следующем разделе мы продемонстрируем это на примере.

Задача расчета энергетических уровней чрезвычайно важна, поэтому рассмотрим второй метод (KILIMANN and EBELING, 1990), в основе которого лежит численное исследование, проведенное Роджерсом и др. (ROGERS et al., 1970, 1988). Авторы показали, что энергетический уровень k исчезает при определенном критическом значении отношения радиуса Бора к дебаевскому радиусу. Данная критическая величина равна:

$$X_k = \left(\frac{a_0^2}{r_D} \right)_{\text{критич.}} \quad (3.5.20)$$

В дальнейшем будем рассматривать лишь водородоподобные уровни, которые характеризуются главным квантовым числом s и орбитальным квантовым числом l . Энергетический уровень сливается с непрерывным спектром при условии, когда энергетическая щель:

$$I_{sl}^{z-1} = |E_s^{(z-1)}| - \Delta_{sl}^{(z-1)} = 0, \quad (3.5.21)$$

исчезает при $(\kappa a_0^z) = X_{sl}$ в соответствии с результатами численного исследования (ROGERS and GRABOSKE, 1970; BESSIS et al., 1975). Например, для основного состояния $X_{10} = 1, 19$. Таким образом мы приходим к многочлену четвертого порядка (EBELING and LEIKF, 1991):

$$\Delta_{sl}^{(z-1)} = Z\varepsilon^2 \kappa \left\{ 1 - \frac{1}{2} \tilde{\kappa} \langle \rho \rangle_{sl} + \frac{1}{6} \tilde{\kappa}^2 \langle \rho^2 \rangle_{sl} - \frac{1}{24} \tilde{\kappa}^3 \langle \rho^3 \rangle_{sl} + f_{sl}^{(z-1)} (\kappa a_0^z)^4 \right\}, \quad (3.5.22)$$

который соответствует первым членам теории возмущений, а также численным результатам.

Определим выражения для средних значений величин ρ , ρ^2 и ρ^3 :

$$\langle \rho \rangle_{sl} = \frac{1}{2} [3s^2 - l(l+1)], \quad (3.5.23)$$

$$\langle \rho^2 \rangle_{sl} = \frac{1}{2} [5s^2 + 1 - 3l(l+1)] s^2, \quad (3.5.24)$$

$$\langle \rho^3 \rangle_{sl} = \frac{7}{4} s^2 \langle \rho^2 \rangle_{sl} - \frac{3}{16} s^2 [(2l+1)^2 - 9] \langle \rho \rangle_{sl},$$

а сам параметр ρ определяется в соответствии:

$$\rho = \frac{r}{a_0^z}. \quad (3.5.25)$$

Используя приведенные соотношения, получим следующее выражение для f_{sl} :

$$f_{sl}^{(z-1)} = \frac{1}{2k^2 X_{sl}} - 1 + \frac{X_{sl}(\rho)}{2} - \frac{X_{sl}(\rho^2)}{6} + \frac{X_{sl}(\rho^3)}{24}. \quad (3.5.26)$$

Коэффициент $f_{sl}^{(z-1)}$, фигурирующий в многочлене, выражается через критическое значение X_{sl} , при котором уровень (sl) сливается с непрерывным спектром. Таким образом, сдвиг уровня является функцией, зависящей только от одного параметра $X = xa_0^z$. Из уравнения (3.5.22) получаем:

$$\Delta_{sl}^{z-1} = 2X |E_{kl}^{(z-1)}| \left\{ 1 - a_{sl}^{(z-1)} X + b_{sl}^{(z-1)} X^2 - C_{sl}^{(z-1)} X^3 + f_{sl}^{(z-1)} X^4 \right\}. \quad (3.5.27)$$

С коэффициентами, полученными из (3.5.22)–(3.5.24), уравнение (3.5.27) применимо в области, где:

$$X \leq X_{sl}. \quad (3.5.28)$$

Предположим, что уровни связанных состояний, достигая границы непрерывного спектра, присоединяются к самому нижнему его уровню. При этом вследствие затухания они сильно уширяются, поэтому в дальнейшем нет смысла считать их квазистационарными связанными состояниями (KILMANN and EBELING, 1990).

Рассчитав энергетические уровни, можно легко вычислить спектральные линии и соответствующие сдвиги спектральных линий. Интересен тот факт, что при расчете сдвигов спектральных линий с помощью нашей формулы вклады Δ_e и Δ_n взаимно уничтожаются, что приводит к:

$$\Delta\nu(sl \rightarrow s'l') = h^{-1} \Delta_{sl}^{z-1} - h^{-1} \Delta_{s'l'}^{z-1}. \quad (3.5.29)$$

Видим, что $\Delta\nu$ зависит исключительно от безразмерного параметра X . При достижении критического значения $X = X_{sl}$, спектральные линии сливаются, и сдвиги становятся бессмысленными.

Теперь оценим область применимости данной теории. Самым существенным ее ограничением является тот факт, что мы пренебрегаем эффектом блокировки Паули, суть которого состоит в том, что электроны не

могут занять состояния, которые уже заняты другими электронами. Среди других эффектов этот ведет к относительной «жесткости» связанных состояний. Для образования в плазме связанного состояния (атома, иона и т. д.) необходимо некоторое пространство, которое не может быть занято другими электронами. Рассмотрим простую оценку влияния данных эффектов. Частица с радиусом R , находясь в плазме, приводит к следующим сдвигам химического потенциала (в приближении для второго вириального коэффициента):

$$\Delta\mu = \frac{1}{3}4\pi k_B T R^3 (n_e + \sum n_z). \quad (3.5.30)$$

Пусть сдвиги энергетических уровней соответствуют сдвигам химического потенциала, тогда для образования связанного состояния sl необходимо определенное конечное пространство, что ведет в свою очередь к сдвигу энергетического уровня.

Для упрощения дальнейших расчетов рассмотрим плазму, которая состоит только из ядер с зарядом $z = Z$ и электронов. Зная, что

$$R \approx a_0 s^2, \quad (3.5.31)$$

получим следующую оценку сдвига с учетом эффектов блокировки Паули (KILIMANN and EBELING, 1990):

$$\Delta E_{sl}^{(Z-1)} \approx \frac{4\pi}{3} (a_0^Z s^2)^3 (n_e + n_Z) k_B T. \quad (3.5.32)$$

Более тщательное исследование данного эффекта содержится в работе BORNATH et al. (1990), где используется новая модификация уравнения Бете-Солпитера (KRAEFT et al., 1990; см. также раздел 4.6).

Объединяя уравнения (3.5.22) и (3.5.32), получим следующую формулу для сдвигов энергетических уровней (с точностью до первого порядка по электронной плотности):

$$\begin{aligned} \Delta_{sl}^{(Z-1)} = Z e^2 \kappa \left[1 - \frac{3}{4} (3s^2 - l^2 - l) (\kappa a_0) + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{3} k_B T s^6 (Z^{-3} + Z^{-4}) (n_e a_0^3) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3.5.33)$$

Следуя этой оценке можно увидеть, что вышеприведенное кулоновское приближение становится неприменимым при условии:

$$\frac{4\pi}{3} s^6 (Z^{-3} + Z^{-4}) (n_e a_0^3) \gg \frac{Z e^2 \kappa}{k_B T}. \quad (3.5.34)$$

Иначе говоря, при больших квантовых числах и высокой температуре эффекты блокировки Паули могут играть существенную роль. Однако замечим, что уравнение (3.5.33) является слишком грубой аппроксимацией, поэтому эффект блокировки с его помощью можно переоценить.

3.6. Кинетика процессов ионизации и переходов между уровнями

Кинетика ионизационных и переходных процессов в идеальной плазме изучена хорошо (см., например, работы GRIEM, 1968, 1974; ГРАНОВСКИЙ, 1971; БИБЕРМАН и др., 1982). Однако исследование эффектов неидеальности все еще находится на зачаточной стадии (КЛИМОНТОВИЧ, 1980, 1982; КЛИМОНТОВИЧ и др., 1987; SCHLANGES et al., 1988). Мы далее будем следовать двум относительно элементарным соображениям.

(I) Пусть внутреннее распределение электронов по уровням внутри атома или иона определяется законами равновесной термодинамики. В качестве свободных переменных данной теории (которые могут быть неравновесными) будет выступать плотность свободных электронов n_e , а также плотности n_z различных частиц с зарядом z .

(II) Учитывая отсутствие равновесия между уровнями, для полного описания системы необходимо ввести понятие числа заполнения n_k^z уровня k частицы с зарядом z .

Начнем с первого, более элементарного утверждения. Для соответствия с нашей теорией, которую мы излагали выше, запишем следующее уравнение равновесия:

$$\frac{n_e n_{z+1}}{n_z} = K_z(T) \exp\left(-\frac{\chi_z}{k_B T}\right). \quad (3.6.1)$$

Здесь $K_z(T)$ — константа равновесия, соответствующая символической реакции:



Параметр χ_z характеризует снижение энергии ионизации иона с зарядом $+ze$. Данный параметр связан с разностью значений химических потенциалов. Процедура минимизации плотности свободной энергии f требует

$$\chi_z = \left(-\frac{\partial}{\partial n_z} + \frac{\partial}{\partial n_e} + \frac{\partial}{\partial n_{z+1}}\right) f_{int}, \quad (3.6.3)$$

где f_{int} — составляющая плотности свободной энергии, обусловленная взаимодействием.

Предлагается следующая форма уравнений для кинетики электронов:

$$\frac{dn_e(r, t)}{dt} = \sum_{z=0}^{Z-1} (\alpha_z^R n_z + \alpha_z n_e n_z - \beta_z^R n_e n_{z+1} - \beta_z n_e^2 n_{z+1}) - \nabla j_e. \quad (3.6.4)$$

Коэффициенты в данном выражении описывают следующие процессы: α_z^R — ионизацию под действием внешнего источника, например, лазерного излучения; α_z — ионизацию вследствие столкновений электронов; β_z^R — излучательную рекомбинацию; β_z — трехчастичную рекомбинацию. Параметр j_e обозначает диффузионный ток.

Предположим, что в плотной термической плазме коэффициент ионизации представлен эйринговой степенной зависимостью от энергии ионизационной щели:

$$\alpha = \alpha_{id} \exp\left(-\frac{\chi}{k_B T}\right), \quad (3.6.5)$$

где χ — снижение энергии ионизации. В условиях неидеальной плазмы вследствие изменения эффективной энергии ионизации значения данных коэффициентов оказываются сильно зависящими от плотности. С учетом уравнения (3.6.5) преобразуем идеальное выражение для коэффициентов скорости к виду:

$$f_\alpha^z = \frac{\alpha_{z-1}}{\alpha_{z-1}^{id}} = \frac{\alpha_{z-1}^R}{\alpha_{z-1}^{R,id}} = \exp\left(-\frac{\chi_z}{k_B T}\right). \quad (3.6.6)$$

С другой стороны, предположим, что коэффициенты рекомбинации лишь незначительно зависят от плотности и в первом приближении этим можно пренебречь. Принятые нами допущения не противоречат квантово-статистическим результатам по водороду, а также закону действующих масс для неидеальной плазмы, описанному выше, который должен выполняться в статическом случае. По этим причинам мы сможем использовать следующее приближение:

$$\frac{\beta_z}{\beta_z^{id}} = \frac{\beta_z^R}{\beta_z^{R,id}} = 1. \quad (3.6.7)$$

Итак, мы полностью определили уравнения для кинетики электронов в неидеальной плазме, содержащей многозарядные ионы.

До сих пор мы рассматривали связанные электроны только в общем, не отличая различных возбужденных состояний. Для более полной картины, необходимо учитывать электроны в k -ом квантовом состоянии для иона с зарядом z ($z = 0, \dots, Z - 1$) раздельно, что соответствует второму утверждению (II), приведенному выше. При таком более полном описании системы константы скорости ионизации и рекомбинации оказываются зависимыми от начального и конечного состояний. Чтобы оценить влияние эффектов неидеальности, снова предположим, что при переходах на верхние уровни ($k \rightarrow l, E_l > E_k$) константы скорости содержат эйринговы экспоненты, а переходы на нижние уровни идентичны идеальным. Тогда,

$$\frac{\alpha_z(k \rightarrow l)}{\alpha_z^{id}(k \rightarrow l)} = \frac{\alpha_z^R(k \rightarrow l)}{\alpha_z^{R,id}(k \rightarrow l)} = \exp\left(-\frac{\Delta_k^z - \Delta_l^z}{k_B T}\right). \quad (3.6.8)$$

Здесь параметром Δ_k^z обозначаются сдвиги энергетических уровней, о которых мы говорили в разделе 3.5.

Отметим, что константы скорости являются лишь оценочными величинами. Для построения более полной теории, помимо сдвигов энергетических уровней, необходимо также учитывать вклады эффектов неидеальности в процессы рассеяния.

Дадим короткий вывод более точных соотношений для коэффициентов уравнения (3.6.4). На все коэффициенты (которые в условиях идеальной плазмы не зависят от плотности) влияют эффекты неидеальности. Во-первых, рассмотрим влияние на константы скорости различных реакций. Главным образом, ограничимся рассмотрением процессов ионизации и рекомбинации вследствие столкновений электронным ударом, пренебрежем радиационным и диффузионным (однородный случай) эффектами. Тогда изменение плотности электронов можно представить в следующем виде:

$$\frac{dn_e}{dt} = \sum_{z \geq 0} (\alpha_z n_e n_z - \beta_z n_e^2 n_{z+1}). \quad (3.6.9)$$

Общие свойства членов, соответствующих источникам, в уравнении для плотности, можно узнать из термодинамики неравновесных процессов (DE GROOT and MAZUR, 1962). Если коэффициенты определяются, главным образом, процессами взаимодействия между частицами, уравнение для скорости необходимо строить на основе кинетической теории (KREMP et al., 1991).

Для простоты рассмотрим пространственно однородную водородную плазму ($Z = 1$), состоящую из атомов водорода (0), протонов (1) и электро-

нов (e). Сначала построим квантово-кинетические уравнения, которые описывают химически реагирующие системы свободных и связанных частиц. Ранее такие уравнения были выведены на основе неравновесных функций Грина (BORNATH et al., 1988). В них учитываются такие многочастичные эффекты, как собственноэнергетическая часть γ и эффект заполнения фазового пространства. Несмотря на то, что данные кинетические уравнения были выведены для случая короткодействующих потенциалов, они оказываются применимыми и в нашем случае, поскольку в кулоновской системе эффективно взаимодействие вследствие экранирования носит короткодействующий характер.

Вывод уравнения для скорости построим на основе работы Эбелинга и др. (EBELING et al., 1987). Учтем, что

$$\frac{dn_e}{dt} = -\frac{dn_0}{dt}. \quad (3.6.10)$$

Сначала запишем кинетическое уравнение для атомов в невырожденном случае (эффекты заполнения фазового пространства не рассматриваются):

$$\frac{\partial}{\partial t} F_k(P, t) = I_k^{\text{расс.}}(P, t) + I_k^{\text{перепр.}}(P, t) + I_k^{\text{реакц.}}(P, t), \quad (3.6.11)$$

где k -- внутреннее квантовое число, а $F_k(P, t)$ -- функция распределения Вигнера. Интегралы столкновений описывают различные процессы рассеяния атомов и свободных заряженных частиц. Значками u и v будем обозначать пару электрон-протон для атома в начальном состоянии. Значком w -- свободный электрон или протон.

(1) Упругое и неупругое рассеяние

$$(u + v) + w \longleftrightarrow (\bar{u} + \bar{v}) + \bar{w},$$

$$I_k^{\text{расс.}} = \frac{1}{\hbar V} \sum_{a=e,1} \int \frac{dp_a}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\bar{k}} \frac{dP}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp_a}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \times$$

$$\times \delta(\tilde{E}_{uvw}^w - \tilde{E}_{\bar{u}\bar{v}\bar{w}}^w) |\langle k P P_a | \tau_{uvw}^{ww} | \bar{P}_a \bar{P} \bar{k} \rangle|^2 \{ \bar{f}_a \bar{F}_{\bar{k}} - f_a F_k \}, \quad (3.6.12)$$

(2) Перегруппировки

$$(u + v) + w \longleftrightarrow (\bar{u} + \bar{w}) + \bar{v}, \quad \bar{u} \longleftrightarrow \bar{v},$$

$$I_k^{\text{перепр.}} = \frac{1}{\hbar V} \int \frac{dp_e}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\bar{k}} \frac{d\bar{P}_{uw}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{p}_e}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \times$$

$$\times \delta(\tilde{E}_{uvw}^w - \tilde{E}_{\bar{u}\bar{v}\bar{w}}^w) |\langle k P_{uv} p_e | \tau_{uvw}^{wv} | \bar{P}_e \bar{P}_{uw} \bar{k} \rangle|^2 \times$$

$$\times \{ \bar{f}_e \bar{F}_{\bar{k}}(\bar{P}_{uw}, t) - f_e F_k(P_{uv}, t) \}, \quad (3.6.13)$$

(3) Ионизация и рекомбинация

$$\begin{aligned}
 & (u + v) + w \longleftrightarrow \bar{u} + \bar{v} + \bar{w}, \\
 I_k^{\text{реакц.}} = & \frac{1}{\hbar V} \sum_{a=e,1} \int \frac{dp_a}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{p}_a}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\tilde{p}_e}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\tilde{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} \times \\
 & \times 2\pi\delta(\tilde{E}_{uvw}^w - \tilde{E}_{uvw}^0) |(kPp_a | \tau_{uvw}^{wo} | \bar{p}_a \tilde{p}_e \tilde{p}_1)|^2 \times \\
 & \times \left\{ \bar{f}_a \tilde{f}_e \tilde{f}_1 - f_a F_k \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.6.14}$$

Здесь $f_a = f_a(p_a, t)$; $\bar{f}_a = f_a(\bar{p}_a, t)$; $F_k = F_k(P, t)$ и т. д.

В выражениях для интегралов столкновений мы использовали обозначения многоканальной теории (TAYLOR, 1972). Энергии каналов равны:

$$\tilde{E}_{uvw}^0 = \tilde{E}_u + \tilde{E}_v + \tilde{E}_w, \quad \tilde{E}_{uvw}^u = \tilde{E}_u + \tilde{E}_{kPvw}, \quad \text{и т. д.} \tag{3.6.15}$$

где \tilde{E}_a и \tilde{E}_{kPvw} – квазичастичные энергии свободной и связанной частиц, соответственно. В данных выражениях влияние окружающей неравновесной среды учтено через энергетические сдвиги, которые должны быть вычислены самосогласованным образом из решения кинетических уравнений. Т-матрицы в уравнениях (3.6.12)–(3.6.14) описывают трехчастичное рассеяние, они определяются уравнением (SCHLANGES et al., 1988):

$$\tau_{uvw}^{\gamma\gamma'}(z, t) = V_{uvw}^{\gamma} + i^2 V_{uvw}^{\gamma} G_{uvw}(z, t) V_{uvw}^{\gamma'}, \tag{3.6.16}$$

в котором $G_{uvw}(z, t) = (H_{uvw}^{eff}(t) - z)^{-1}$ есть резольвента трех взаимодействующих квазичастиц. Потенциалы каналов равны:

$$\begin{aligned}
 V_{uvw}^0 & = V_{uv} + V_{uw} + V_{vw}, \\
 V_{uvw}^u & = V_{uv} + V_{uw}, \quad \text{и т. д.}
 \end{aligned} \tag{3.6.17}$$

Чтобы получить уравнение для плотности, необходимо проинтегрировать по переменной P уравнение (3.6.11) и просуммировать по всем внутренним состояниям. Легко видеть, что конечный результат будет зависеть исключительно от интеграла столкновений $I^{\text{реакц.}}$. Возникает следующее уравнение для скорости:

$$\frac{dn_e}{dt} = \alpha_0 n_e n_0 - \beta_0 n_e^2 n_1, \tag{3.6.18}$$

в котором коэффициенты α и β явно выражаются через величины теории рассеяния, где учтена зависимость от среды. Константа скорости ионизации

равна:

$$\begin{aligned} \alpha_0 = & \frac{1}{\hbar V} \sum_{a=e,1} \sum_k \int \frac{dP}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp_a}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{P}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} \times \\ & \times \frac{d\bar{p}_a}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi\delta(\tilde{E}_{uvw}^{rw} - \tilde{E}_{uvw}^0) \frac{f_a}{n_a} \frac{F_k}{n_0} \times \\ & \times |\langle kPp_a | \tau_{uvw}^{ww} | \bar{p}_a \rangle | \bar{p} \bar{P} + \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.6.19)$$

Константа скорости рекомбинации равна:

$$\begin{aligned} \beta_0 = & \frac{1}{\hbar V} \sum_{a=e,1} \sum_k \int \frac{dP}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp_a}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{P}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\bar{p}}{(2\pi\hbar)^3} \times \\ & \times \frac{d\bar{p}_a}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi\delta(\tilde{E}_{uvw}^{rw} - \tilde{E}_{uvw}^0) \frac{\bar{f}_a}{n_a} \frac{f_e}{n_e} \frac{f_1}{n_1} \times \\ & \times |\langle kPp_a | \tau_{uvw}^{ww} | \bar{p}_a \rangle | \bar{p} \bar{P} + \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.6.20)$$

Здесь $\bar{P} = \tilde{p}_e + p_1$, $\tilde{p} = \frac{m_1 \tilde{p}_e - m_e \tilde{p}_1}{m_e + m_1}$.

В уравнениях (3.6.19) и (3.6.20) мы ввели T-матрицу τ_{uvw}^{ww} с ионизованным атомом в конечном состоянии рассеяния. Ее получают точным преобразованием (BORNATH et al., 1988).

Для определения констант скорости α и β необходимо знание функций распределения и решения задачи рассеяния, характер которого определяется средой. Если допустить существование локального равновесия (КЛИМОНТОВИЧ, 1982), сделать это будет проще. Для изотермической плазмы функции распределения имеют вид:

$$f_a(p_a, t) = n_a(t) \Lambda_a^3 \exp\left(-\frac{p_a^2}{2m_a k_B T}\right), \quad (3.6.21)$$

$$F_k(P, t) = n_k(t) \Lambda_0^3 \exp\left(-\frac{P^2}{2m_0 k_B T}\right). \quad (3.6.22)$$

Мы можем использовать энергии свободных заряженных частиц в нулевом порядке (БИБЕРМАН и др., 1962; KRAEFT et al., 1986):

$$\tilde{E}_a = \frac{p_a^2}{2m_a} + \Delta_a. \quad (3.6.23)$$

Предположим, что заполнением возбужденных состояний можно пренебречь. Применяя адиабатическое приближение и не учитывая реакции вследствие протонных ударов, получим следующее выражение для константы скорости ионизации:

$$\alpha_{ij} = \frac{8\pi m_e}{(2\pi m_e k_B T)^{3/2}} \int_{|E_1|+\Delta}^{\infty} d\left(\frac{p_e^2}{2m_e}\right) \frac{p_e^2}{2m_e} \exp\left(-\frac{p_e^2}{2m_e k_B T}\right) \sigma^{\text{ион}}(p_e), \quad (3.6.24)$$

где $\sigma^{\text{ион}}$ — эффективное сечение ионизации основного энергетического уровня, равное:

$$\sigma^{\text{ион}} = \int d\vec{p} \vec{p}^2 \int d\Omega_{\vec{p}} d\Omega_{\vec{p}_e} \frac{\vec{p}_e}{P_e} \frac{m_e^2}{4\pi^2 \hbar^7} |\langle 1p_e | \tau_{uv}^{ww} | \vec{p}_e \vec{p} + \rangle|^2. \quad (3.6.25)$$

Чтобы получить аналитическое решение, рассмотрим Т-матрицу низшего порядка в первом борновском приближении с использованием кулоновских потенциалов. Далее применим метод Бете (BETHE, 1930), но дополнительно учтем многочастичные эффекты через квазичастичные энергии согласно уравнению (3.6.23). Эффективное сечение ионизации будет равно:

$$\sigma^{\text{ион}} = 2, 5\pi a_0^2 \frac{|E_1|}{\left(\frac{p_e^2}{2m_e}\right)} \ln \left(\frac{\frac{p_e^2}{2m_e} - \chi}{|E_1|} \right), \quad (3.6.26)$$

$$\chi = \Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0, \quad (3.6.27)$$

где χ — снижение энергии ионизации. Тогда получаем следующие константы скорости ионизации:

$$\alpha = \alpha_{id} \exp\left(-\frac{\chi}{k_B T}\right), \quad (3.6.28)$$

где α_{id} — идеальная константа скорости ионизации:

$$\alpha_{id} = \frac{-10\pi a_0^2}{(2\pi m_e k_B T)^{1/2}} |E_1| \text{Ei} \left(-\frac{|E_1|}{k_B T} \right), \quad (3.6.29)$$

здесь функция Ei определяется как:

$$\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x dt \frac{e^t}{t}. \quad (3.6.30)$$

Данные уравнения находятся в соответствии с формулой идеальной константы скорости ионизации, которое предложено Биберманом и др. (BIBERMANN et al., 1982).

Если воспользоваться законом сохранения энергии, то получим следующее соотношение α и β :

$$\beta = \alpha \Lambda_e^3 \exp\left(\frac{-E_1 + \Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0}{k_B T}\right), \quad (3.6.31)$$

$$\Lambda_e = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T}\right)^{1/2}. \quad (3.6.32)$$

Более детальный анализ, где принимается во внимание возможное вырождение частиц (эффект заполнения фазового пространства) (SCHLANGES and BONARTH, 1989) дает слегка измененное выражение для константы скорости рекомбинации:

$$\beta = \frac{n_0}{n_e n_1} \alpha \exp\left(\frac{\mu_e^{id} + \mu_1^{id} - \mu_0^{id}}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{\Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0}{k_B T}\right). \quad (3.6.33)$$

Сравнивая уравнения (3.6.27)–(3.6.28) и (3.6.31), видим, что экспоненциальная поправка по плотности в выражении для константы скорости рекомбинации пропадает и мы имеем

$$\beta \cong \beta_{id}. \quad (3.6.34)$$

Константа скорости рекомбинации не демонстрирует столь сильной экспоненциальной зависимости от плотности, как константа скорости ионизации. Если это так, то она будет более низкого порядка по плотности.

В термодинамическом равновесии вклад, соответствующий источнику в уравнении (3.6.18) пропадает вследствие взаимокомпенсации процессов ионизации и рекомбинации. Согласно уравнениям (3.6.18), (3.6.27)–(3.6.28) и (3.6.34) имеем:

$$\frac{n_e n_1}{n_0} = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{\alpha_{id}}{\beta_{id}} \exp\left(-\frac{\Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0}{k_B T}\right). \quad (3.6.35)$$

Результат соответствует закону действующих масс (уравнению Саха):

$$\frac{n_e n_1}{n_0} = K(T) \exp\left(-\frac{\chi}{k_B T}\right), \quad (3.6.36)$$

где χ — снижение энергии ионизации.

3.6. КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ И ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ УРОВНЯМИ 69

С помощью параметра χ учитываются многочастичные эффекты. Параметр Δ_a характеризует сдвиги квазичастичных энергетических уровней, в «приближении жестких сдвигов» он равен (ZIMMERMANN, 1988):

$$\Delta_a = \frac{\int dp_a \frac{\partial f_a}{\partial \mu_{a,rd}} Re \Sigma(p, \omega)}{\int dp_a \frac{\partial f_a}{\partial \mu_{a,rd}}}. \quad (3.6.37)$$

Здесь f_a — решение квантово-кинетического уравнения для элементарных частиц в составе частицы a , известное под названием функции распределения Вигнера (КЛИМОНТОВИЧ and KREMP, 1981; MC LENNAN, 1982). В нем учитывается процесс образования связанных состояний. $\Sigma(p, \omega)$ — собственно-энергетическая часть. В данном приближении химический потенциал равен:

$$\mu_a = \mu_{a,rd} + \Delta_a, \quad \text{т.е.} \quad \Delta_a = \mu_{a,int}, \quad a = e, 0, 1. \quad (3.6.38)$$

Δ_0 — сдвиг основного энергетического уровня, значение который можно получить из многочастичного уравнения Шредингера для многочастичного атома (KILMANN et al., 1977) $\Delta_e + \Delta_1$ характеризует сдвиг границы непрерывного спектра. Тогда эффективная энергия ионизации (см. рис. 3.6.1) равна:

$$I = E + \Delta_0 - \Delta_e - \Delta_1 = E - \chi. \quad (3.6.39)$$

С увеличением плотности заряженных частиц граница непрерывного спектра $\Delta_e + \Delta_1$ быстро спускается. Сдвиг основного энергетического уровня Δ_0 относительно слабый (см. раздел 3.5). Когда достигается так называемая плотность Мотта, энергетическая щель исчезает.

Мы знаем, что с увеличением плотности резко возрастает значение константы скорости ионизации α . Данное явление можно легко объяснить с физической точки зрения (EBELING et al., 1989). Комбинируя уравнения (3.6.29) и (3.6.28) для низкотемпературного предела, приходим к закону Аррениуса-Эйринга, в котором константа α рассматривается как экспонента от энергии активации:

$$\alpha \sim \exp\left(\frac{I}{k_B T}\right). \quad (3.6.40)$$

Для плазмы роль энергии активации играет параметр I (эффективная энергия ионизации), который определяется щелью между границей непрерывного спектра и основным энергетическим уровнем.

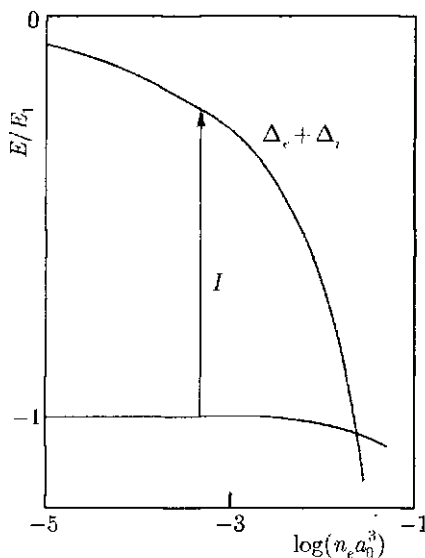


Рис. 3.6.1. Зависимости границы непрерывного спектра и основного энергетического уровня (для водорода) от плотности электронов $n_e a_0^3$. При достижении плотности Мотта основной энергетический уровень перестает существовать

До сих пор мы рассматривали только электроны. Два других дифференциальных уравнения в частных производных (для ионов и нейтральных частиц) в случае простой плазмы, состоящей из однозарядных ионов, выводятся аналогичным образом. Таким образом, кинетику водородоподобной плазмы можно описать с помощью трех дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla j_e &= w_e(n_e, n_i, n_A, T), \\ \frac{\partial n_1}{\partial t} + \nabla j_1 &= w_1(n_e, n_1, n_0, T), \\ \frac{\partial n_0}{\partial t} + \nabla j_0 &= w_0(n_e, n_1, n_0, T), \end{aligned} \quad (3.6.41)$$

где $w_e = w_1 = -w_0 = w$ — исходная функция, вывод которой мы привели выше. Данная функция описывает изменение плотности вследствие

3.6. КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ И ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ УРОВНЯМИ 71

протекаания различных реакций. $j_a(a = e, 0, 1)$ — диффузионные потоки, связанные с градиентом плотности коэффициентом диффузии:

$$j_a = -D_a \nabla n_a, \quad a = e, 0, 1. \quad (3.6.42)$$

Итак, мы приходим к уравнениям, описывающим, процессы увеличения и уменьшения количества частиц вследствие ионизации, обусловленной столкновениями электронов и трехчастичной рекомбинацией (ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1984). Единственным отличием является тот факт, что константа скорости α является функцией, зависящей от плотности заряженных частиц.

Решение системы связанных уравнений (3.6.41) является весьма сложной задачей, поэтому далее мы воспользуемся приближением амбиполярной диффузии, в котором предполагается строгое поддержание электронейтральности, то есть диффузия электронов и ионов должна протекать с одинаковой скоростью (EBELING et al., 1984). Также мы предположим, что плотность тяжелых частиц (атомов и ионов) неизменна:

$$n(r, t) = n_0 + n_1 \equiv \text{const}. \quad (3.6.43)$$

В этом случае базовая система уравнений (3.6.41) сводится к одному реакционно-диффузионному уравнению, которое для плотности электронов имеет вид (EBELING et al., 1989):

$$\frac{\partial n_e(r, t)}{\partial t} = w(n_e, n, T) + \nabla D(n_e, n, T) \nabla n_e, \quad (3.6.44)$$

$$w(n_e, n, T) = \alpha_{id} \exp\left(-\frac{\Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0}{k_B T}\right) (n - n_e) n_e - \beta_{id} n_e^3. \quad (3.6.45)$$

Величина диффузионного потока в уравнении (3.6.44) может быть выведена из кинетической теории. Если предположить существование электронейтральности, то, пренебрегая градиентами давления, получим (EBELING et al., 1984; BONITZ et al., 1989):

$$j_e = j_i = -D_{id} \left\{ 1 + \frac{n_e}{k_B T} \left(\frac{\partial \Delta_e}{\partial n_e} + \frac{\partial \Delta_1}{\partial n_1} \right) \right\} \nabla n_e, \quad (3.6.46)$$

т. е.

$$D = D_{id}(n_e, n_A, T) \left\{ 1 + \frac{n_e}{k_B T} \left(\frac{\partial \Delta_e}{\partial n_e} + \frac{\partial \Delta_1}{\partial n_1} \right) \right\}. \quad (3.6.47)$$

Здесь D_{id} — коэффициент амбиполярной диффузии для случая, когда не учитываются многочастичные эффекты. Очевидно, что коэффициенты амбиполярной диффузии для электронов и ионов совпадают. Для газовой плазмы применимо адиабатическое приближение ($m_e/m_1 \ll 1$), поэтому параметр D_{id} можно выразить через коэффициент ионно-атомной диффузии $D_{id} = 2D_{i-a}$ (ЛИФШИЦ, ПИТАЕВСКИЙ, 1979). Для слабо ионизированных газов можно пренебречь взаимодействием между частицами. В этом случае коэффициент диффузии явно получается из теории Чепмена-Энскога и в низшем порядке получаем:

$$D_{i-a} = \frac{3(2\pi k_B T)^{1/2}}{16nm_{i-a}\bar{\sigma}}. \quad (3.6.48)$$

Здесь m_{i-a} — приведенная масса пары ион-атом, а $\bar{\sigma}$ — сечение резонансной перезарядки, величину которого можно установить из разных источников, например, работы Смирнова (СМИРНОВ, 1978).

Эффекты неидеальности в диффузионном потоке, а также в реакционных процессах определяются квазичастичными сдвигами Δ_a ($a = e, 0, 1$). В рамках приближения жестких сдвигов они могут быть оценены из вкладов взаимодействия свободных и связанных частиц.

Общие свойства уравнения (3.6.44), в значительной мере определяются нулями функции-источника $w(n_e, n, T)$, т. е. ее стационарными состояниями. Особым свойством уравнения (3.6.44), является тот факт, что в определенном диапазоне температур и плотностей функция-источник имеет четыре нуля, два из которых соответствуют стабильным стационарным состояниям, а два других — нестабильным. В этом состоит особенность кинетики ионизации для достаточно плотной плазмы, по сравнению со случаем, когда рассматривается идеальная или почти идеальная плазма. Следствием данного явления является возможное образование таких пространственных структур, как движущиеся и неподвижные фронты или нуклеация. Более подробно мы их обсудим в разделе 4.8.

ГЛАВА 4

Термодинамические и кинетические свойства простой плазмы

4.1. Термодинамические соотношения

Исследование плотной плазмы, состоящей из легких элементов, имеет большое значение при изучении звезд и планет. Однако на сегодняшний день существуют не менее интересные технические разработки, связанные с исследованием плазмы вблизи электрода в дугах или плазмы, созданной мощным лазером или потоками частиц (см., например, работы ПРОХОРОВ и др., 1976; АНИСИМОВ и др., 1984). Большинство существующих теорий ограничивается исследованием водородной и водородоподобной плазмы (SCHLAGES and KREMP, 1982; EBELING and RICHERT, 1985a, 1985b; EBELING et al., 1986a, 1988; HARONSKA et al., 1987), для которой хорошо разработаны квантово-статистические методы, или, с другой стороны, исследованием плазмы, состоящей из тяжелых элементов, для которой по теории Томаса–Ферми разработаны хорошие приближения (КИРЖНИЦ и др., 1975). В связи с серьезными концептуальными и вычислительными трудностями, плазму, состоящую из элементов второго или третьего периодов периодической системы, исследуют в недостаточном объеме (HUBBARD and SLATTERY, 1971; STEVENSON, 1975; HUMMER and MIHALAS, 1988). В данной главе мы попробуем устранить этот пробел и рассмотрим такие понятия, как степень ионизации, уравнение состояния, кинетика процессов ионизации и рекомбинации. В первом разделе речь пойдет о термодинамических соотношениях, лежащих в основе расчета компонентного состава плазмы и термического уравнения состояния.

Рассмотрим плазму при постоянных температуре и объеме, которая состоит из фиксированного количества элементарных частиц (свободных и связанных электронов) и ядер. В химической картине (EBELING et al., 1976a) различные связанные состояния ядер и электронов считаются отдельными частицами со своим зарядом, энергетическим спектром, массой и эффективным радиусом. Мы будем рассматривать систему, состоящую из

нейтральных атомов ($z = 0$), ионов с зарядом z ($z = 1, \dots, Z$; $Z \leq Z_{\text{ядра}}$) плотностью числа частиц n_z и свободных электронов e с плотностью n_e . $Z_{\text{ядра}}$ — заряд ядра, а Z — максимальный заряд в модели (см. раздел 4.4). Общая плотность n тяжелых частиц (плотность ядер) остается постоянной:

$$\sum_{z=0}^Z n_z = n = \text{const.} \quad (4.1.1)$$

В термодинамике равновесных состояний должно выполняться условие электронейтральности:

$$\sum_{z=0}^Z z n_z = n_e. \quad (4.1.2)$$

Компонентный состав плазмы $\{n_z\}$ можно также выразить через относительные доли тяжелых частиц $\{\alpha_z\}$:

$$\alpha_z = \frac{n_z}{n}, \quad \sum_{z=0}^Z \alpha_z = 1. \quad (4.1.3)$$

В качестве обобщенной степени ионизации возьмем средний заряд тяжелых частиц \bar{z} :

$$\bar{z} = \sum_{z=0}^Z z \alpha_z = \frac{n_e}{n}. \quad (4.1.4)$$

Параметр \bar{z} соответствует среднему ионизационному состоянию в модели среднего атома (иона) (см. разделы 4.5, 5.2, 6.2).

Обсуждение процессов ионизации и рекомбинации

$$i_z \longleftrightarrow i_{z+1} + e, \quad z = 0, \dots, Z - 1, \quad (4.1.5)$$

начнем с понятия объемной плотности свободной энергии

$$F/V = f(n_0, \dots, n_Z, n_e, T). \quad (4.1.6)$$

В условиях постоянства плотности и температуры эта функция при термодинамическом равновесии достигает минимума. Соответствующая вариационная задача $\delta f = 0$ совместно с условиями сохранения частиц приводит к простым законам действующих масс для химических потенциалов:

$$\mu_z = \mu_{z+1} + \mu_e, \quad z = 0, \dots, Z - 1, \quad (4.1.7)$$

$$\mu_k = \frac{\partial f}{\partial n_k}, \quad k = z, e. \quad (4.1.8)$$

Химические потенциалы μ_k можно разделить на две составляющие: идеальную (*id*) и обусловленную взаимодействиями (*int*):

$$\mu_k = \mu_k^{id} + \mu_k^{int}. \quad (4.1.9)$$

Вследствие бoльцмановского характера тяжелых частиц ($z = 0, \dots, Z$) можно записать:

$$\mu_z^{id} = k_B T \ln \frac{n_z \Lambda_z^3}{\sigma_z}, \quad (4.1.10)$$

$$\Lambda_z = \frac{h}{(2\pi m_z k_B T)^{1/2}}, \quad (4.1.11)$$

где Λ_z — дебройлевская длина волны атома/иона i_z . С учетом вышеописанного уравнение (4.1.7) представим в виде связанной системы неидеальных уравнений Саха:

$$n_z = n_{z+1} \frac{\sigma_z}{\sigma_{z+1}} \exp\left(\frac{\mu_e^{id} - \Delta I_z}{k_B T}\right). \quad (4.1.12)$$

Здесь ΔI_z — снижение энергии ионизации

$$\Delta I_z = \mu_z^{int} - \mu_{z+1}^{int} - \mu_e^{int}. \quad (4.1.13)$$

Суммы по состояниям (статистические суммы) σ_z определяются следующим образом:

$$\sigma_z = \exp\left(\frac{\sum_{k=z+1}^{Z-1} I_k}{k_B T}\right) \bar{\sigma}_z, \quad z = 0, \dots, Z-2, \quad (4.1.14)$$

$$\sigma_{Z-1} = \bar{\sigma}_{Z-1},$$

$$\sigma_Z = g_0^Z.$$

Далее мы воспользуемся представлением (FÖRSTER and KAHNBAUM, 1990), при котором предполагается, что статистические суммы $\bar{\sigma}_z$ различных ионов подчиняются правилу Бриллюэна–Планка–Ларкина:

$$\bar{\sigma}_z = \sum_m g_m^z \left[\exp\left(\frac{-E_m^z}{k_B T}\right) - 1 + \frac{E_m^z}{k_B T} \right], \quad z = 0, \dots, Z-1. \quad (4.1.15)$$

I_z — невозмущенные (положительные) энергии ионизации. Значения энергетических уровней E_m^z ($-I_z \leq E_m^z < 0$) и их статистические веса g_m^z для основного и возбужденных состояний тяжелых частиц устанавливаются по стандартным таблицам, например, Мур (1949, 1952, 1958). Энергетическую шкалу выбираем таким образом, чтобы нулевое значение энергии соответствовало полностью ионизированному состоянию. Статистические суммы ядер (или элементарных ионов) с зарядовым числом Z равны статистическим весам их основных состояний при условии, что они не содержат возбужденных состояний.

Собственно говоря, справедливость правила Бриллюэна–Планка–Ларкина была продемонстрирована только по отношению к водородоподобной плазме при малых плотностях (EBELING et al., 1976a, 1984), но мы будем предполагать, что оно применимо и к более сложным случаям.

В случае идеальной плазмы ($\Delta I_z \equiv 0$) система связанных уравнений Саха (4.1.12) дополняется условием электронейтральности (4.1.2) и может быть решена аналитически, в результате чего получается следующий состав плазмы:

$$n_0 = \frac{n_e \sigma_0}{\sum_{k=1}^Z k \sigma_k \exp\left(-\frac{k\mu_e^{sd}(n_e, T)}{k_B T}\right)}, \quad (4.1.16)$$

$$n_z = n_0 \frac{\sigma_z}{\sigma_0} \exp\left(-\frac{k\mu_z^{sd}(n_e, T)}{k_B T}\right), \quad z = 1, \dots, Z.$$

Состав плазмы выражен через параметры n_e и T . В случае идеальной плазмы при постоянной температуре существует взаимно-однозначное соответствие между плотностью электронов n_e и плотностью тяжелых частиц n .

Для неидеальной плазмы система уравнений (4.1.2) и (4.1.12) может быть решена только численным методом.

Полное давление p в условиях равновесия (термическое уравнение состояния) равно:

$$p = \mu_e n_e + \sum_{z \geq 0} \mu_z n_z - f. \quad (4.1.17)$$

Введем понятие *суммарного химического потенциала* μ (FÖRSTER et al., 1991a):

$$\mu \equiv \text{по опред.} \mu_z + z\mu_e, \quad \forall z. \quad (4.1.18)$$

Его можно рассматривать как химический потенциал нейтральной комбинации частиц плазмы: одного иона, несущего заряд z и z электронов, $z \geq 0$. Далее кратко опишем некоторые основные свойства μ .

1. Параметр μ не зависит от зарядового числа z , что очевидно при использовании уравнений Саха (4.1.7).

2. На основе уравнения (4.1.2) можно показать, что изменение плотности свободной энергии в условиях электронейтральности df при постоянном объеме и температуре будет равно:

$$d\tilde{f} = \mu dn. \quad (4.1.19)$$

\tilde{f} — плотность свободной энергии на гиперповерхности в пространстве индивидуальных плотностей ($n_0, n_1, \dots, n_z, n_e$). Для каждого фиксированного значения плотности n_e она определяется с помощью ограничения, определенного уравнением (4.1.2). Получаем следующие аналитические выражения для f :

$$\tilde{f}(n_0, \dots, n_z, T) = f(n_0, \dots, n_z, \sum_{z=0}^z zn_z, T). \quad (4.1.20)$$

При таком представлении плотности свободной энергии \tilde{f} , которое предполагает выполнение условия электронейтральности, а также уравнения (4.1.19) получим соотношение:

$$\mu = \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial n} \right)_{T, V = \text{const}}. \quad (4.1.21)$$

3. При условии электронейтральности уравнение состояния (4.1.17) сводится к виду:

$$p = n\mu - f. \quad (4.1.22)$$

Всё вышесказанное доказывает, что в плазме, содержащей ядра единственного сорта, суммарный химический потенциал μ соответствует обычному химическому потенциалу в однокомпонентных системах.

Это ведет к простой конструкции Максвелла для плазменного фазового перехода (FÖRSTER et al., 1991a). Плазменный фазовый переход проявляется типичной ван-дер-ваальсовой петлей докритической изотермы (температура T) как для давления, так и суммарного химического потенциала. Следуя уравнениям (4.1.19) и (4.1.21) соотношения Максвелла получим в виде:

$$p(n^I, T) = p(n^II, T) \quad \text{и} \quad \mu(n^I, T) = \mu(n^II, T), \quad (4.1.23)$$

где n^I и n^II — плотность числа тяжелых частиц двух сосуществующих фаз I и II при температуре T . Соотношения Максвелла приводят к появлению линии сосуществования на плоскости давление-температура, а также области сосуществования на плоскости плотность-температура.

Для плазмы, несущей единичный положительный заряд ($Z = 1$), например, электрон-дырочной плазмы в полупроводниках или водородной плазмы, в соотношениях Максвелла используется сумма химических потенциалов $\mu_e + \mu_{\text{дыр}}$ или $\mu_e + \mu_1$, соответственно. Впервые подобный случай рассмотрели Эбелинг и др. (EBELING et al., 1976b).

Заметим, что, в отличие от параметра μ , значения химических потенциалов μ_e и μ_z ($z \geq 1$) для сосуществующих фаз не совпадают. На первый взгляд, это противоречит термодинамическим правилам: по идее, в условиях равновесия отдельные химические потенциалы разных частиц для сосуществующих фаз должны быть равны, т.е. $\mu_e^I = \mu_e^{II}$. К примеру, подразумевается, что три электрона могут беспрепятственно перемещаться между двумя фазами. Однако неконтрольное движение заряженных частиц привело бы к нарушению условия электронейтральности, которое должно соблюдаться для каждой фазы. Проблема решается следующим образом: в термодинамике заряженных частиц необходимо, чтобы выполнялось равенство электрохимических потенциалов. Любое отличие в значениях химических потенциалов заряженных частиц для двух фаз будет означать, что на границе между фазами формируется двойной электрический слой. Соответствующий шаг электростатического потенциала ϕ между двумя фазами равен:

$$\phi^{II} - \phi^I = \frac{1}{e} (\mu^{II} - \mu^I). \quad (4.1.24)$$

Условие равенства химических потенциалов в обеих фазах выполняется только для нейтральных комбинаций заряженных частиц, т.е. для суммарного химического потенциала μ . Особую роль играют атомы, для которых по определению $\mu_0 \equiv \mu$ (уравнение (4.1.18)). Атомы являются электрически нейтральными, поэтому их собственный химический потенциал принимает одинаковое значение для двух фаз: $\mu^I = \mu^{II}$.

До сих пор все возбужденные состояния в атоме или ионе мы рассматривали как единую частицу. Однако существует другой термодинамический подход, в рамках которого каждое квантовое связанное состояние учитывается индивидуально. В разделах 3.1–3.2 мы уже упоминали, что суть данного подхода состоит в следующем: каждое (внутреннее) состояние связанных частиц (атомов, молекул и ионов) рассматривается как отдельный сорт частиц со своими специфическими свойствами и относительным числом заполнения. При этом идеальная плотность свободной энергии рав-

на:

$$f_{id} = f_{id}^{(c)} + k_B T \sum_i n_i \left[\ln \left(\frac{n_i \Lambda_i}{\tilde{g}_i} \right) - 1 \right] + \sum_k n_k \left[E_k + \ln \left(\frac{n_k \Lambda_k^3}{\tilde{g}_k} \right) - 1 \right]. \quad (4.1.25)$$

Первое слагаемое данного уравнения соответствует вкладу электронов, включая случаи вырождения, второе слагаемое (суммирование по i) — вкладу ядер или элементарных ионов, а третье слагаемое (суммирование по k) — вкладу различных связанных состояний с квантовым числом k , энергией связанного состояния E_k и числом заполнения n_k . Весовые коэффициенты выбираются согласно перенормировке Бриллюэна-Планка-Ларкина (EBELING et al., 1976a)

$$\tilde{g}_k(T) = g_k \left[1 - \exp \left(\frac{E_k}{k_B T} \right) + \frac{E_k}{k_B T} \exp \left(\frac{E_k}{k_B T} \right) \right]. \quad (4.1.26)$$

Преимуществом данного подхода является полноценное описание каждого связанного состояния, т. е. определение всех возможных чисел заполнения. Но оперирование слишком большим количеством переменных (вариационных параметров) можно отнести к недостатку теории. Создается впечатление, что анализ химического равновесия при таком подходе, основанном на понятии числа заполнения, лучше проводить путем непосредственной минимизации плотности свободной энергии

$$f = f(n_e, \{n_i\}, \{n_k\}; T) \rightarrow \min, \quad (4.1.27)$$

нежели решением системы связанных уравнений Саха.

В зависимости от поставленной задачи, предпочтительнее применять тот или иной подход. При решении кинетических задач, связанных с неравновесной заселенностью, никак нельзя проигнорировать подход, основанный на понятии чисел заполнения. Тем не менее, существует множество задач, для решения которых достаточно ввести единственный параметр плотности числа частиц для каждой атомной или ионной частицы.

4.2. Термодинамика водорода

Здесь мы рассмотрим чисто водородную плазму и особенно сконцентрируем внимание на существовании фазовых переходов. Известно, что в системах с дальнедействующими кулоновскими взаимодействиями, помимо классического фазового перехода первого рода, характерного для нейтральных газов, может происходить второй переход первого рода

(LANDAU and ZELDOVICH, 1943; НОРМАН, СТАРОСТИН, 1968, 1970). В области сосуществования данного перехода система делится на две фазы различного плазменного состава (разной степени ионизации) с различными массовыми плотностями. Предполагается, что двухфазная область локализуется в зоне сильного взаимодействия и неполной ионизации. Этот так называемый плазменный фазовый переход тесно связан с переходом металл-диэлектрик (АЛЕКСЕЕВ, ЯКУБОВ, 1983; HENSEL, 1984). Несмотря на то, что в последние 20 лет проводились многочисленные экспериментальные и теоретические исследования, до сих пор не ясно, какова природа переходных процессов в реальных ионизированных системах. Существуют многочисленные экспериментальные и теоретические факты, свидетельствующие, что в металлах переход ван дер Ваальса и плазменный фазовый переход объединяются в единый переход смешанного типа (БУШМАН, ФОРТОВ, 1983; REDMER and RÖPKE, 1989). Однако в водородной и водородоподобной плазме эти два перехода достаточно легко отделить друг от друга. Таким образом, с принципиальной точки зрения, этот случай является более простым, по сравнению с металлическими системами. Цель данного раздела состоит в систематическом исследовании типичных свойств фазового перехода в водороде.

Согласно нашей модели плотность свободной энергии системы складывается из трех составляющих:

$$f = f_{id} + f_{Coul} + f_{hc} + f_{vdW}, \quad (4.2.1)$$

где f_{id} — вклад идеального газа, f_{Coul} — вклад кулоновских взаимодействий, f_{hc} — вклад твердых сфер и f_{vdW} — вклад притяжения ван дер Ваальса.

Величина идеального вклада известна точно, а кулоновский вклад может быть взят из нашей ранней работы, частично он рассматривается в разделах 3.1–3.3. На данный момент мы можем применить:

(I) одночленные аппроксимации Якоби-Паде (TANAKA and ICHIMARU, 1985);

(II) несимметричные двучленные аппроксимации Якоби-Паде (EBELING and RICHERT, 1985 a, b);

(III) симметричные двучленные аппроксимации Якоби-Паде (EBELING, 1985);

(IV) несимметричные трехчленные аппроксимации Якоби-Паде (см. разделы 3.3–3.4).

В качестве примера несимметричных трехчленных аппроксимаций используем вариант, развитый в разделе 3.3, который может быть записан в

виде:

$$f_{Coul} = n_e(\phi_e + \phi_i + \phi_{ie}), \quad (4.2.2)$$

где

$$\begin{aligned} \phi_e = & - \left[1,633r_s^{-3/2}\tau^{-1/2} + 1,5r_s^{-3}\tau^{-1} + 51,82r_s^{-7}\tau^{-7/2} + \right. \\ & \left. + 7,035r_s^{-6}\tau^{-7/2} \ln \left(1 + \frac{2,117}{r_s^{1/2} + 0,3008r_s} \right) \right] \times \\ & \times \left[1 + 1,949r_s^{-3/2}\tau^{-1} + 2,3r_s^{-3}\tau^{-3/2} + 56,45r_s^{-6}\tau^{-7/2} \right]^{-1}, \\ \phi_i = & -\tau \left\{ 1,182\tilde{n}^{1/2} + 0,0004\tau\tilde{n} + 10^3\tilde{n}^{11/6} \left[1,447 - 4,294\tilde{n}^{-1/4} + \right. \right. \\ & \left. \left. + 0,6712\tilde{n}^{-5/12} + (0,2726 \ln \tilde{n} + 2,983)\tilde{n}^{-1/3} \right] \right\} \left(1 + 0,0329 \times \right. \\ & \left. \times (\tau\tilde{n})^{1/2} + 10^3\tilde{n}^{3/2} \right)^{-1}, \\ \phi_{ie} = & - \frac{0,9789\tau\tilde{n}^{1/2} - \tilde{n}^{3/2}\phi_{ep}^{(0)}}{1 + p_1(\tau)\tilde{n}^{1/2} + \tilde{n}^{3/2}}, \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

$$\begin{aligned} \phi_{ep}^{(0)} = & -\tau r_s \frac{0,8511\tilde{n}^{1/12}}{(1 + 0,3135\tilde{n}^{-1/12})(1 + 2,5\tilde{n}^{-1/3})} - \\ & - \tau r_s \frac{(0,0726 + 0,0161r_s)\tilde{n}^{1/3}}{(1 + 0,0887r_s^2)}, \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

$$p_1(\tau) = 2,844\tau^{1/2} \left[0,3874 + 0,2821\tau^{1/2} \exp(-0,6267\tau^{1/2}) \right]. \quad (4.2.5)$$

Параметры принимают значения:

$$\begin{aligned} \tau = \frac{k_B T}{Ry}, \quad r_s = \frac{3}{4\pi n_e a_0^3}, \\ \tilde{n} = \frac{6}{\pi(r_s \tau)^3}, \quad \bar{n} = \frac{6\pi^{1/2}}{r_s^3 \tau^{-3/2}}, \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

где n_e — плотность свободных электронов. Довольно длинное выражение (4.2.3) является не более, чем простой интерполяцией между различными аналитическими результатами для таких предельных случаев, как (I) энергии основного состояния электронного газа, (II) дебаевского закона с квантовыми поправками, (III) аналитической формулы, представляющей результаты исследований методом Монте-Карло для ионных флюидов и включающей поправку на экранирование.

Теперь опишем вклад ван дер Ваальса, который необходимо модифицировать по сравнению с разделом 3.1, поскольку теперь мы учитываем возможное образование молекул водорода. Представив атомы в виде сфер, а молекулы — в виде двух соприкасающихся сфер, воспользуемся следующей аппроксимацией:

$$f_{hc} = \tau \frac{(n_0 + 2n_m)(4\eta - 3\eta^2)}{(1 - \eta)^2} - 2\pi n_e \ln(1 - \eta), \quad (4.2.7)$$

$$\eta = \frac{4\pi}{3} R^3 (n_a + 2n_m),$$

$$f_{vdW} = (n_a + 2n_m)^2 b, \quad (4.2.8)$$

где R — радиус атома, b — постоянная ван дер Ваальса для сил притяжения. Логарифмический член уравнения (4.2.7) соответствует классическому эффекту исключенного объема для вклада электронов и протонов по аналогии с уравнением (3.1.18). Свободная энергия измеряется в ридбергах (Ry).

Состав плазмы опишем следующими параметрами:

$$\alpha = \alpha_1 = \frac{n_1}{n}, \quad \beta = \frac{n_0}{n_0 + 2n_m}. \quad (4.2.9)$$

n — общая плотность числа протонов (свободных и связанных), включающая плотность числа молекул n_m ,

$$n = n_0 + n_1 + 2n_m. \quad (4.2.10)$$

Для расчета состава плазмы и уравнения состояния, необходимо минимизировать функцию f при условии постоянства плотности тяжелых частиц и условий электронейтральности (см. раздел 4.1).

Заметим, что атомы и молекулы здесь рассматриваются в очень грубом приближении. Более полно явление взаимодействия нейтралов учитывается в работах других авторов (SCHLANGES and KREMP, 1982; ROBNIK and KUNDT, 1983; HARONSKA et al., 1987; SAUMON and CHABRIER, 1989).

Вышеприведенные термодинамические функции можно использовать лишь для описания газовой области на фазовой диаграмме. В газовой области расположены две критические точки. Первая критическая точка и линия сосуществования, соответствующая переходу ван дер Ваальса от газа H_2 к жидкости H_2 , полностью локализируются в области нулевой ионизации и нулевой диссоциации, т. е. когда система представлена только молекулами. Вкладом кулоновских взаимодействий здесь можно пренебречь ($f_{Coul} = 0$).

Данные о системе в первой критической точке хорошо известны:

$$C_1: T_c = 33 \text{ К}, p_c = 1,3 \text{ МПа}, \rho_c = 0,031 \text{ г/см}^3, \alpha_c = 0, \beta_c = 0.$$

Состояние системы в данной точке согласно нашей простой теории можно описать подгонкой двух параметров, R и b . Положение второй критической точки точно не известно. Рассматриваемая теория позволяет получить следующую оценку (при $R = 0,815 \text{ \AA}$):

$$C_2: T_c = 16500 \text{ К}, p_c = 22,8 \text{ ГПа}, \rho_c = 0,13 \text{ г/см}^3, \alpha_c = 0,32, \beta_c = 1.$$

На рис. 4.2.1 (EBELING and RICHERT, 1985b) изображена критическая точка плазменного фазового перехода, линия сосуществования и другие характеристические линии. Прямые $\alpha = \text{const}$ и $\beta = \text{const}$ связывают состояния, характеризующиеся равной степенью ионизации и диссоциации, соответственно. Вблизи критической точки C_2 происходит резкое изменение состава плазмы. Также мы видим, что две сосуществующие фазы вблизи критической точки ионизированы лишь частично. При низких температурах рядом могут сосуществовать молекулярный газ и металлическая жидкость. Область твердого молекулярного водорода мы взяли из работы Керли (KERLEY, 1972). В тройной точке

$$T_T \approx 1500 \text{ К}, p_T \approx 100 \text{ ГПа},$$

могут сосуществовать три фазы (металлическая жидкость, твердый молекулярный водород и жидкий молекулярный водород).

Сравним полученные результаты с критическими данными, рассчитанными Франком (FRANCK, 1980) или Робником и Кундтом (ROBNIK and KUNDT, 1983):

$$T_c = 19000 \text{ К}, p_c = 24 \text{ ГПа}, \alpha_c = 0,5, \beta_c = 1.$$

а также с ранними оценками Эбелинга и Сэндига (EBELING and SÄNDIG, 1973):

$$T_c = 12600 \text{ К}, p_c = 94 \text{ ГПа}, \rho_c = 1 \text{ г/см}^3, \alpha_c = 0,008, \beta_c = 1.$$

Как можно видеть оценки совпадают по порядку величины. Заметим однако, что критические данные сильно зависят от выбранного приближения, поэтому необходимо дальнейшее совершенствование теории.

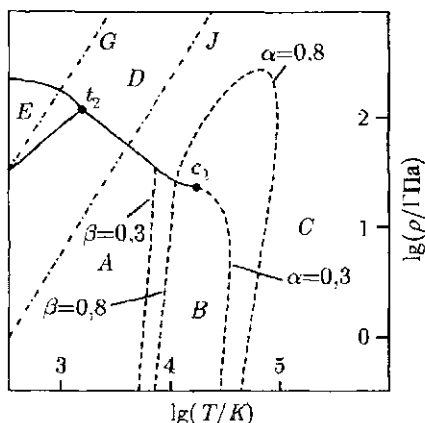


Рис. 4.2.1. Фазовая диаграмма водорода со второй критической точкой c_2 и линией сосуществования $c_2 - t_2$ (EBELING and RICHERT, 1985b). А: область жидкого молекулярного водорода. В: область слабо ионизованной плазмы. С: область сильно ионизованной плазмы. D: область металлического водорода. Е: оценка для области твердого молекулярного водорода. G: оценка для ударной адиабаты (ГРИГОРЬЕВ и др., 1975). J: оценка для адиабаты Юпитера (ROBNIK and KUNDT, 1983)

В недавней работе других исследователей (SAUMON and CHABRIER, 1989) содержится иной расчет линии сосуществования и критической точки. Они применили усовершенствованную модель уравнения состояния, основанную на реалистичных значениях потенциалов при взаимодействии нейтральных частиц, и получили следующие данные:

$$T_c = 15000 \text{ К}, \quad p_c = 65 \text{ ГПа}, \quad \rho_c = 0,36 \text{ г/см}^3.$$

Более того, в рамках данной модели фаза за пределами линии сосуществования не является полностью ионизованной («металлической»), а характеризуется умеренной ионизацией.

В различных моделях угол наклона линии сосуществования либо положителен (ROBNIK and KUNDT, 1983; HARONSKA et al., 1987; MARLEY and HUBBARD, 1988), либо отрицателен (EBELING and RICHERT, 1985b;

SAUMON and CHABRIER, 1989). В общем случае, угол наклона линии перехода подчиняется закону Клазиуса-Клапейрона:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta s}{\Delta v}, \quad (4.2.11)$$

где Δs и Δv — разность значений удельной энтропии и удельного объема для двух фаз. С феноменологической точки зрения, отрицательный угол наклона линии сосуществования в плазменного фазового перехода более логичен, поскольку при пересечении линии сосуществования с линией сжатия происходит увеличение энтропии (EBELING et al., 1988).

Но самое важное, на что стоит обратить внимание, это резкое снижение давления при переходе в фазу металлического водорода, по сравнению с соответствующим давлением перехода в твердое состояние, которое ожидается в диапазоне выше 200 ГПа (KERLEY, 1972; ГРИГОРЬЕВ и др., 1972, 1975; MON et al., 1980; MAO and HEMLEY, 1989). Предполагается, что при переходе из фазы жидкого молекулярного водорода в фазу жидкого металлического водорода давление будет в 10 раз меньше, чем при переходе из фазы твердого молекулярного водорода в фазу твердого металлического водорода. Данное явление может иметь большое значение в лабораторных опытах по адиабатическому сжатию водорода, а также для астрофизических приложений. Для наглядности на рис. 4.2.1 изображена адиабата, построенная на основе экспериментальных результатов по адиабатическому сжатию (ГРИГОРЬЕВ и др., 1975). Опираясь на предложенные нами оценки, металлизация вещества недр Юпитера происходит при гораздо более низких значениях давления, т.е. ближе к поверхности планеты, чем это предполагалось ранее. Для того чтобы осуществить переход металл-диэлектрик для водорода в лабораторных условиях, необходимо провести сложные экспериментальные исследования. Результаты недавних статических экспериментов по водороду при 77 К (MAO and HEMLEY, 1989) показали, что металлизация происходит при 200 ГПа.

Для изучения переходов при более высоких температурах, надо начать с экспериментов по адиабатическому сжатию при начальных условиях, близких к адиабате Юпитера. Григорьев и др. (ГРИГОРЬЕВ и др., 1972, 1975) проводили опыты для плотности от 1,1 г/см³ до 1,3 г/см³ при давлении около 280 ГПа и температуре 10⁴ К. Впоследствии Неллис и др. (NELLIS et al., 1982, 1983), Росс и др. (ROSS et al., 1983) заявили о данных, полученных для двух диапазонов давлений при плотностях до 0,5 г/см³ с падением давления при росте плотности (см. рис. 4.2.2). Эти экспериментальные находки могли бы послужить первым доказательством существования плазменного фазового перехода в водороде.

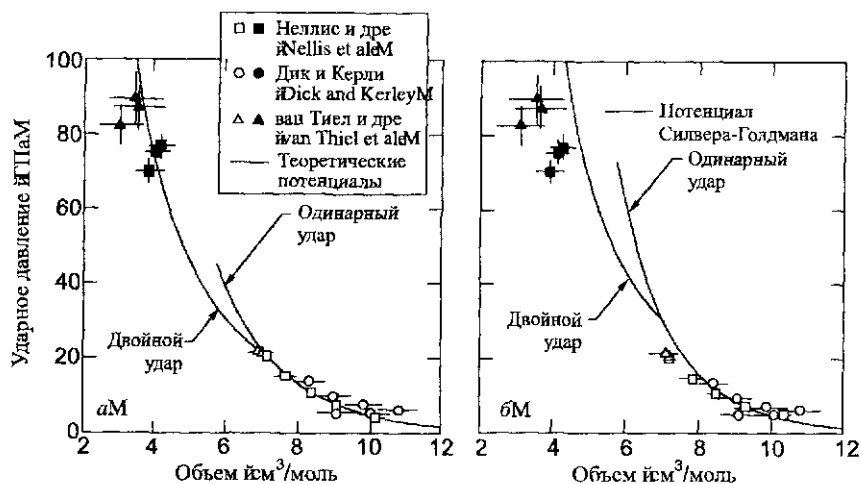


Рис. 4.2.2. Прямая и отраженная ударная адиабаты для дейтерия, построенные на основе данных Росса и др. (ROSS et al., 1983). Сплошные линии соответствуют теоретическим расчетам с использованием эффективного парного потенциала

На сегодняшний день так и не существует надежных данных, которые можно рассматривать, как экспериментальное доказательство. Вопрос существования плазменного фазового перехода в водороде пока остается открытым, для его решения необходимы дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования.

4.3. Термодинамика гелия и водородно-гелиевых смесей

Одним из самых распространенных элементов во вселенной является гелий; его доля по массе 22%. На Земле гелий довольно редок, но в больших планетах и Солнце он играет центральную роль.

Начнем с описания термодинамических соотношений, для этого воспользуемся вариантом теории, использующей формализм чисел заполнения. Суть подхода, описанного в разделах 3.1–3.2, состоит в том, что каждое (внутреннее) состояние связанных частиц (атомов, молекул и ионов) рассматривается как отдельная частица со своими специфическими свойствами (такими как эффективный объем) и относительным числом заполнения. Идеальная свободная энергия берется в соответствии с выраже-

нием (4.1.24), а весовые множители — согласно перенормировке Бриллюэна-Шланка-Ларкина (EBELING et al., 1976a)

$$\tilde{g}_k(T) = g_k \left[1 - \exp\left(\frac{E_k}{k_B T}\right) + \frac{E_k}{k_B T} \exp\left(\frac{E_k}{k_B T}\right) \right]. \quad (4.3.1)$$

Для кулоновской части в разделе 3.3 мы сконструировали аппроксимации Якоби-Паде, которые заключают в себе аналитическое описание поведения плотности свободной энергии. Отличительной особенностью формул Якоби-Паде является плавный переход от $n^{1/2}$ при малых плотностях к $n^{1/3}$ при больших плотностях. Аппроксимации Якоби-Паде не уникальны; существует несколько их модификаций. Другим важным свободным параметром, от которого зависят результаты, является радиус атомов гелия. При температуре $T = 30\,000$ К мы выбрали значение равное $1,062 \text{ \AA}$. В качестве радиусов однократно ионизированных частиц выбраны значения:

$$\begin{aligned} & 1,54 \cdot \frac{0,5292}{Z} \text{ \AA}, \quad \text{для } s = 1, \\ & s^2 \cdot \frac{0,5292}{Z} \text{ \AA}, \quad \text{для } s > 1, \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

где s — главное квантовое число. Для ионов и атомов будем учитывать четыре квантовых состояния ($s = 1, 2, 3, 4$), что явно недостаточно и требует дальнейшего усовершенствования теории, но не изменяет общей картины.

Полная свободная энергия плазмы получается минимизацией плотности свободной энергии при условии постоянства полного количества электронов (свободных и связанных).

Для начала рассмотрим чисто гелиевую плазму. Помимо относительных долей $\{\alpha_k\}$,

$$\alpha_z = n_z/n, \quad \sum_{z=0}^2 \alpha_z = 1, \quad (4.3.3)$$

введем параметр α , равный отношению количества свободных электронов к полному количеству электронов (свободных и связанных),

$$\alpha = \frac{n_e}{2n}. \quad (4.3.4)$$

К примеру, α_2 — это отношение количества ионов гелия He^{++} к общему количеству ядер гелия. Параметры α и α_2 выступают здесь, как независимые

величины. Используя баланс электронов и ядер получим соотношения:

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= 1 + \alpha_2 - 2\alpha, \\ \alpha_1 &= 2\alpha - 2\alpha_2,\end{aligned}\tag{4.3.5}$$

которые используются для расчета остального состава.

На рис. 4.2.1 и 4.2.2 продемонстрированы результаты, полученные минимизацией свободной энергии при $T = 30\,000$ К и $T = 50\,000$ К, как функции полной плотности ядер. На этих рисунках, взятых из ранней работы по гелию (EBELING, 1989b), видно, что с увеличением плотности относительная доля свободных электронов уменьшается, а по достижении своего минимума снова повышается. Данный эффект называется ионизацией давлением. Правее минимума плотность свободных электронов очень велика, и система ведет себя подобно металлической плазме. При средних значениях плотности ядер (порядка $10^{22} - 10^{23}$ см⁻³) свободная энергия достигает двух минимумов, что говорит о возможности существования двух разных значений α и α_2 при одном значении плотности ядер n . Существование двух минимумов свободной энергии должно рассматриваться как явный намек на фазовый переход первого рода. Более подробное описание структуры ландшафта свободной энергии будет приведено в разделе 4.9.

Опираясь на кривые, изображенные на рис. 4.3.1 и 4.3.2, можно ожидать возникновения фазового перехода в гелиевой плазме по крайней мере при температуре ниже $50\,000$ К. Хесс (HESS, 1989) получил более низкую оценку для температуры перехода ($T_c \approx 28\,500$ К), рассматривая лишь однократную ионизацию. Здесь мы видим, что возможность двукратной ионизации способствует возникновению неустойчивостей и фазовых переходов. Такая тенденция отмечалась уже в ранней работе Валуева и др. (ВАЛУЕВ и др., 1970). Ниже мы более подробно опишем критические данные.

Существует две принципиальные возможности количественного фазового перехода. Первая основана на изучении ландшафтов свободной энергии и включает в себя следующие шаги:

- (I) Полный расчет поверхности свободной энергии как функции всех независимых плотностей;
- (II) Построение касательных плоскостей, соединяющих два минимума функции, которые соответствуют сосуществующим фазам.

В основе альтернативного подхода лежит метод суммарного химического потенциала, разработанный Фёрстером и др. (FÖRSTER et al., 1990, 1991a). Они продолжили фазовую диаграмму ⁴He в область плазмы и пришли к выводу о возможности существования в ней двух независимых плазменных фазовых переходов.

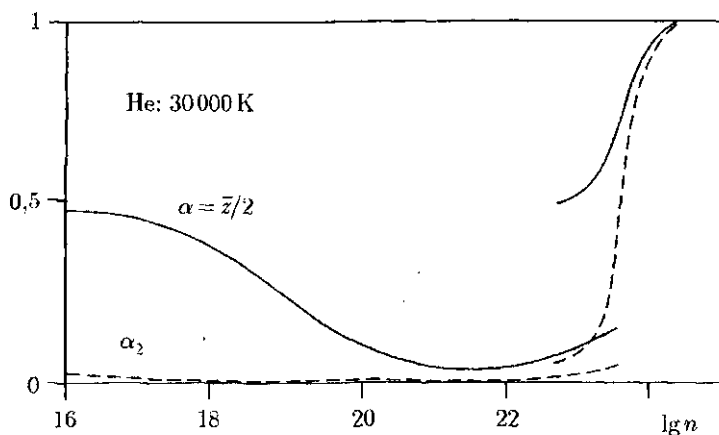


Рис. 4.3.1. Зависимость относительной доли свободных электронов (α) и относительной доли ионов гелия He^{1+} (α_2) от плотности тяжелых частиц для гелиевой плазмы при температуре $T = 30000 \text{ K}$

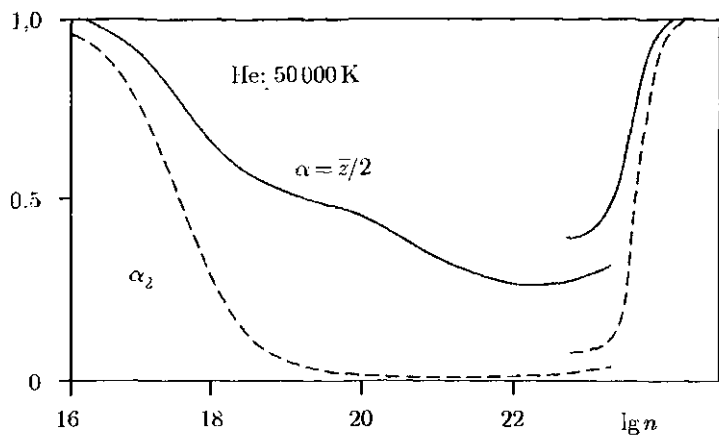


Рис. 4.3.2. Зависимость относительной доли свободных электронов (α) и относительной доли ионов гелия He^{++} (α_2) от плотности тяжелых частиц для гелиевой плазмы при температуре $T = 50000 \text{ K}$

Подведем итог. Фазовая диаграмма для плотной гелиевой плазмы была построена для следующей области:

$$T \leq 10^6 \text{ К}, \quad n \leq 10^{25} \text{ см}^{-3} \quad \text{и} \quad p \leq 10^2 \text{ ГПа.}$$

В данный диапазон параметров входит область частичной ионизации и сильного кулоновского взаимодействия. Отправной точкой опять-таки служит выражение для плотности свободной энергии

$$f = f_{id} + f_{Coul} + f_{vdW} + f_{hc}, \quad (4.3.6)$$

в котором фигурирует вклад кулоновских взаимодействий, вклад притяжения ван дер Ваальса и вклад твердых сфер для смеси разнозаряженных и нейтральных частиц. Вклад кулоновских взаимодействий аппроксимируется формулами Якоби-Паде (см. раздел 3.3). Второй вириальный коэффициент для притяжения ван дер Ваальса вычисляется с использованием потенциала $\exp -6$ (см. раздел 3.1). Зависящий от температуры радиус атомов выбирается согласно работе Баркера и Хендерсона (BARKER and HENDERSON, 1967), где используется тот же вид потенциала. Радиус твердой сферы для ионов He^+ вычисляется как среднее значение радиуса по невозмущенной волновой функции основного состояния: $3a_0/4$.

Чтобы определить состав равновесной плазмы, необходимо решить систему связанных уравнений Саха для химических потенциалов электронов и всех тяжелых частиц, μ_e и μ_z ($z = 0, 1, 2$):

$$\mu_0 = \mu_e + \mu_1 \quad \text{и} \quad \mu_1 = \mu_e + \mu_2. \quad (4.3.7)$$

Система решается при соблюдении условия электронейтральности.

На основе наших расчетов определяется компонентный состав равновесной плазмы. На рис. 4.3.3 изображен состав плазмы для одной из температур. Общую картину ионизационного состояния удобно представить с помощью среднего заряда \bar{z} . На рис. 4.3.4 показаны значения среднего заряда тяжелых частиц для диапазона температур $T \approx 10^4 \dots 10^5$. Вследствие кулоновского взаимодействия средний уровень ионизации имеет минимум, что ведет к формированию долины низкой ионизации. С повышением температуры происходит сдвиг начала влияния взаимодействия и, следовательно, минимального значения \bar{z} в сторону более высоких значений плотностей. Если отношение температуры к соответствующим энергиям ионизации не превышает определенной величины, проявляются ступенчатый характер изменения среднего заряда \bar{z} .

Индивидуальные химические потенциалы μ_e и $\{\mu_z\}$, суммарный химический потенциал μ и уравнение состояния $p(n, T)$ рассчитывались на

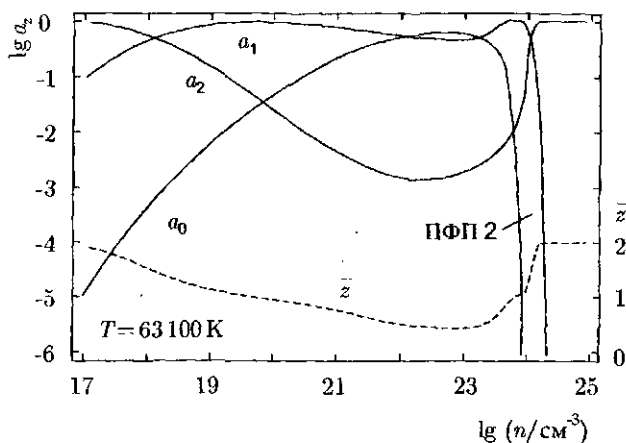


Рис. 4.3.3. Компонентный состав гелиевой плазмы для одного значения температуры. Параметр α_z ($z = 0, 1, 2$) характеризует относительные доли тяжелых частиц, несущих с зарядом z . Параллельно на правую ось нанесены значения среднего заряда тяжелых частиц \bar{z} . В двухфазной области (плазменный фазовый переход 2) показаны средние значения

основе соотношений, приведенных в разделе 4.1. Как для суммарного химического потенциала, так и давления фазовый переход обозначен типичной ван-дер-ваальсовой петлей. В пределах областей сосуществования фаз значения суммарного химического потенциала и давления остаются постоянными. Равновесные величины и границы области сосуществования были определены на основе соотношения Максвелла, построенного для значений μ и p (уравнение (4.1.23)). На рис. 4.3.5 изображены химические потенциалы разных частиц для одной из температур. Данный пример иллюстрирует тот факт, что, в отличие от величины μ , все остальные (отдельные) химические потенциалы заряженных частиц имеют различные значения для сосуществующих фаз. На рис. 4.3.6 показаны изотеры давления для докритических и сверхкритических температур при двух фазовых переходах гелиевой плазмы.

Опираясь на работу Фёрстера и др. (1990, 1991), отразим на фазовых диаграммах последовательность фазовых переходов (рис. 4.3.7a,b и 4.3.8). Для гелиевой плазмы они соответствуют ступеням ионизации $\text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+$ и $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$. В таблице 4.3.1 содержатся данные о системе в критических точках, а также оценочные данные на кривой плавления.

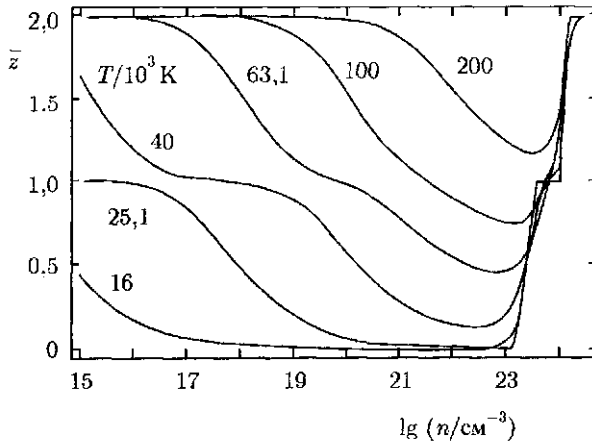


Рис. 4.3.4. Средний заряд тяжелых частиц \bar{z} для гелиевой плазмы при разных температурах. В пределах двухфазных областей, соответствующих плазменным фазовым переходам, показано значение среднего заряда тяжелых частиц

Явление металлизации гелия интенсивно изучалось для случая твердого гелия при низких температурах. Особое внимание уделялось давлению металлизации. На основе расчетов зонной структуры были получены следующие значения давления металлизации: 20 ТПа (SELDAM, 1957), 3 ТПа (ТРУБИЦИН, УЛИНИЧ, 1962), 11,2 ТПа (YOUNG et al., 1981) и 11,0 ТПа (MEYER-TER-VEHN and ZITTEL, 1988). Аналогично случаю водородной плазмы (раздел 4.2), для гелиевой плазмы характерно значительное снижение давления при переходе к металлическому состоянию, по сравнению с соответствующим давлением перехода в твердое состояние.

Остальные детали фазовой диаграммы, касающиеся процесса плавления и других фазовых переходов первого рода в твердом состоянии, а также низкотемпературных свойств, мы взяли из работ других авторов (YOUNG et al., 1981; LOUBEYRE et al., 1982; FRANCK and DANIELS, 1980; CRAWFORD, 1975). Данные по ударным волнам приведены из работы Неллиса и др. (NELLIS et al, 1984).

Однако более тщательное рассмотрение, некулоновских взаимодействий, может дать отличающиеся количественные результаты. Следовательно, приведенный анализ следует рассматривать лишь в качестве первой попытки построения фазовой диаграммы гелия в области частичной ионизации.

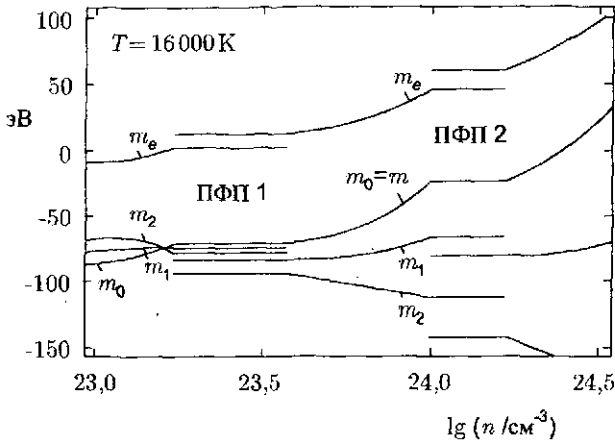


Рис. 4.3.5. Химические потенциалы атомов (0), однозарядных (1) и двухзарядных (2) ионов, электронов (e) гелиевой плазмы. Суммарный химический потенциал обозначен параметром μ . Температура 16000 К

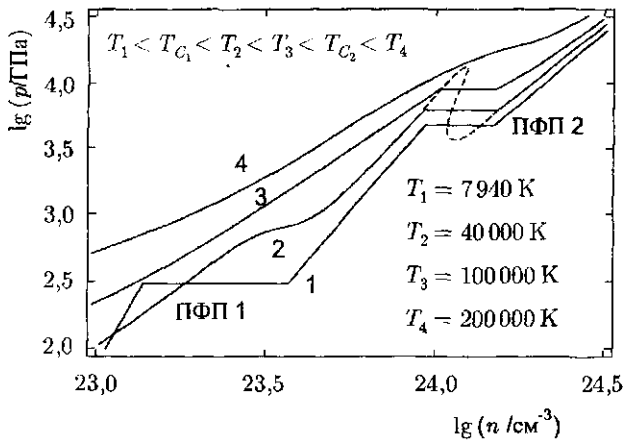


Рис. 4.3.6. Изотермы давления для докритических и сверхкритических температур при двух фазовых переходах гелиевой плазмы. Для одной из температур фазовый переход обозначен типичной ван-дер-ваальсовой петлей (пунктирная линия)

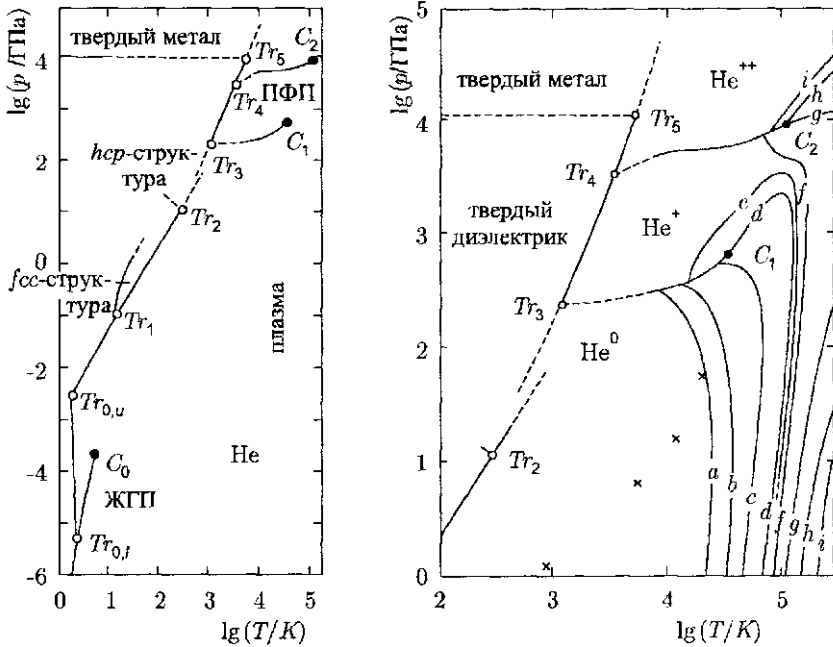


Рис. 4.3.7. а,б. Фазовые диаграммы гелия-4 в плоскости давление-температура. Tr – тройные точки; $0,l$ и $0,u$ – нижняя и верхняя λ -точки; 1 – hcp-структура/fcc-структура/газ; 2 – fcc-структура/hcp-структура(?)/газ; 3 – твердый гелий/ He^+ / He^0 (ПФП 1); 4 – твердый гелий/ He^{++} / He^+ (ПФП 2); 5 – твердый диэлектрик/твердый металл/ He^{++} . C – критические точки: 0 – переход жидкость-газ (ЖГП); 1 – ПФП 1; 2 – ПФП 2. Толстые линии – фазовые переходы (пунктиром показаны экстраполяции). Тонкие линии – постоянный средний заряд тяжелых частиц \bar{z} : а – 0,01; б – 0,1; в – 0,5; д – 0,9; е – 1,0; ф – 1,1; г – 1,5; h – 1,9; и – 1,99. Ударноволновой эксперимент: x – прямая волна; * – отраженная волна

Теперь рассмотрим термодинамические свойства водородно-гелиевых систем. Для теоретического описания смесей водорода и гелия необходимо построить такое выражение свободной энергии, в котором бы учитывались, по крайней мере, двухзарядные ионы и трехчастичные связанные состояния. Вывод выражения свободной энергии опять-таки будем основывать на теории, описанной в разделах 3.1–3.2 (с использованием чисел заполнения). Рассмотрим отдельно составляющие плотности свободной энергии.

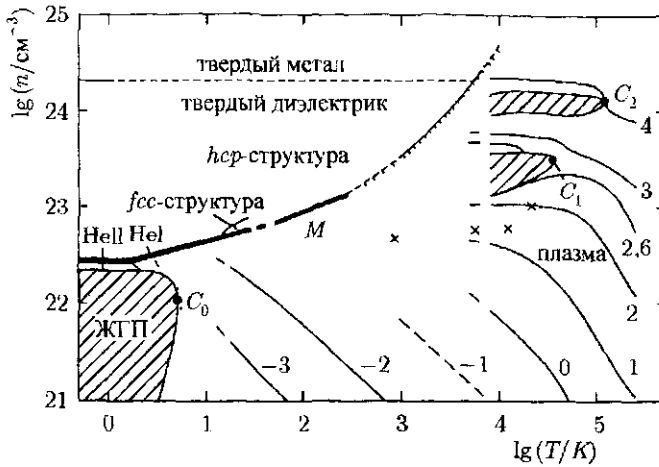


Рис. 4.3.8. Фазовая диаграмма гелия-4 в плоскости давление-температура. Области фазовых переходов первого порядка заштрихованы: ЖГП – переход жидкость–газ; П – зона плавления; ПП1 и ПП2 – два плазменных фазовых перехода, соответствующие ступеням ионизации $\text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+$ и $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$. Тонкими линиями показаны изобары. Давление представлено в единицах $\lg(p/\text{Па})$. Звездочками отмечены ударноволновые точки (см. рис. 4.3.7а,б).

Идеальногазовая плотность свободной энергии (в ридбергах) равна:

$$\begin{aligned}
 f_{id} = & f_{id}^{(e)} + \tau \sum_i n_i \left\{ \left[\ln \left(\frac{n_i \Lambda_i^3}{\tilde{g}_i} \right) - 1 \right] + \right. & (4.3.8) \\
 & + \sum_k n_k^{(ei)} \left[E_k^{(ei)} + \ln \left(\frac{n_k^{(ei)} \Lambda_{ei}^3}{\tilde{g}_k^{(ei)}} \right) - 1 \right] + \\
 & - \sum_k n_k^{(eei)} \left[E_k^{(eei)} + \ln \left(\frac{n_k^{(eei)} \Lambda_{eei}^3}{\tilde{g}_k^{(eei)}} \right) - 1 \right] + \\
 & \left. + \sum_{kj} n_k^{(ejj)} \left[E_k^{(ejj)} + \ln \left(\frac{n_k^{(ejj)} \Lambda_{ejj}^3}{\tilde{g}_k^{(ejj)}} \right) - 1 \right] + \dots \right\}.
 \end{aligned}$$

Первое слагаемое данного уравнения характеризует вклад электронов, включая вырожденные, а величинами

$$E_k^{(ei)}, E_k^{(eei)}, E_k^{(eji)} \quad (4.3.9)$$

обозначены энергии связанных состояний из двух или трех частиц без учета сдвигов энергетических уровней. Квантовое число k представляет энергетические уровни водородоподобных (ei), гелиеподобных (eei) или ионоподобных связанных состояний. В качестве примера рассмотрим смесь водорода и гелия с молярной долей водорода 0,93. Минимизируя плотность свободной энергии, Эбелинг (EBELING, 1989b) пришел к выводу, что при общей плотности ядер, равной $10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$, степень ионизации гелия и водорода достигает минимума, а при более высоких значениях общей плотности резко возрастает. На рис. 4.3.9 представлены степени ионизации при температуре 30000 К, используемые символы имеют следующее значение:

α — отношение количества свободных электронов к общему количеству свободных и связанных электронов;

α_2 — отношение количества ионов гелия He^{++} к общему количеству ядер гелия;

α_H — отношение количества ионов H^+ к общему количеству ядер водорода.

Заметим, что в узком диапазоне плотностей (порядка 10^{23} частиц на куб.см) при $T = 30\,000$ К наблюдаются два минимума свободной энергии, т. е. существует два значения степени ионизации. Это говорит о термодинамической неустойчивости

$$\left[\frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho} \right]_T < 0, \quad (4.3.10)$$

где ρ — массовая плотность. Термодинамическая нестабильность ведет к фазовому переходу в водородно-гелиевой плазме при достижении критиче-

Таблица 4.3.1. Критические и тройные точки, соответствующие фазовым переходам гелиевой плазмы

	$T/10^3 \text{ К}$	$n/10^{23} \text{ см}^{-3}$	$p/\text{ГПа}$	\bar{z}
С 1	35	3,3	0,66	0,8
С 2	120	13	10	1,8
Tr 3	1		0,2	$0 \rightarrow 1$
Tr 4	4		3	$1 \rightarrow 2$

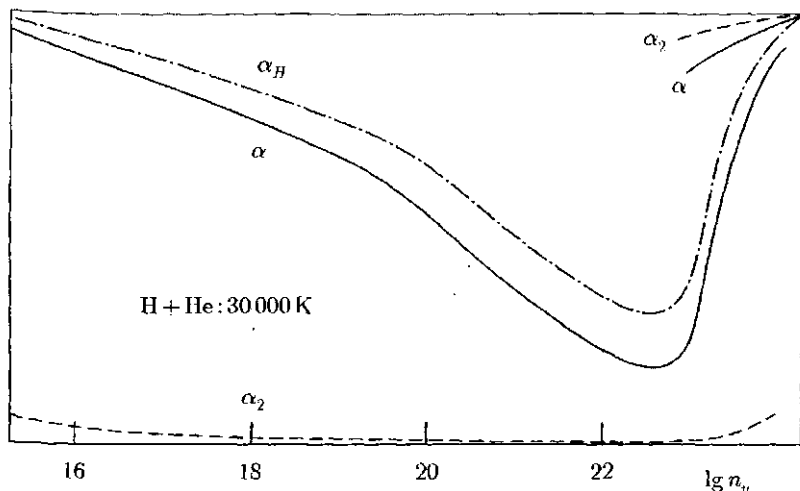


Рис. 4.3.9. Состояние ионизации для водородно-гелиевой смеси (по молярному содержанию на 93% состоящей из водорода и на 7% из гелия) при температуре $T = 30000$ К

ской температуры $T \cong 25000$ К. Напомним, что для случая чисто водородной плазмы критическая температура была равна $T_c = 16500$ К (EBELING and RICHERT, 1985a,b; см. раздел 4.2).

Снова видим, что двукратная ионизация вызывает неустойчивость и фазовые переходы (EBELING and FÖRSTER, 1990). Вследствие относительно высокой электронной плотности энергия ионизации иона гелия резко уменьшается, в результате чего двукратная ионизация оказывается более предпочтительной, чем можно было бы предположить на основе теории идеальной плазмы.

Напомним, что в рамках динамической теории звезд, помимо нарушений равновесия, фигурирующих в уравнении (4.3.10), представляют интерес и другие неустойчивости, например:

$$\left[\frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho} \right]_S < \frac{4}{3}. \quad (4.3.11)$$

Справедливо ли наше уравнение состояния в условиях подобного рода неустойчивостей, предстоит выяснить в дальнейшем.

Прототипом водородно-гелиевой плазмы можно считать внутрисолнечное вещество. С точки зрения физики плазмы, Солнце представляет собой

большой плазменный шар, который можно рассматривать как гигантскую лабораторию по изучению плазмы в широком диапазоне термодинамических параметров. Например, в центре Солнца, где температура превышает 10^7 К, плотность плазмы очень высока (более 10^{25} частиц на куб.см), а ближе к периферии, где температура опускается ниже 10^4 К, плазма является очень разреженной. Для приближенного физического рассмотрения мы моделируем Солнце следующим образом: Солнце — это плазменный шар, который в молярных долях на 90–93% состоит из водорода, на 6–8% — из гелия и менее чем на 2% — из более тяжелых частиц. Считается, что плазменный шар находится в состоянии механического и термодинамического равновесия, распределение температуры и плотности вдоль радиуса известно. Гидродинамическими потоками и отличными от излучения явлениями переноса будем пренебрегать. Однако будем учитывать неравновесность вследствие ядерных реакций, реакций ионизации и радиационных переходов. С физической точки зрения, поглощаемое и переизлучаемое Землей солнечное излучение выступает в качестве движущей силы всех процессов самоорганизации на нашей планете (EBELING et al., 1990). Так называемая «фотонная фабрика» обеспечивает Землю энтропией, необходимой для поддержания и развития жизни, человечества, науки и культуры. Можно легко оценить поток энтропии, поступающий от системы Солнце–Земля, в фоновом излучении, если предположить, что в среднем 230 Вт/м^2 поглощается и переизлучается поверхностью Земли. Считая, что температура поступающих фотонов около 5800 К, а Земля излучает тепло точно так же, как черное тело с температурой 260 К, получаем величину потока энтропии, равную $1 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$. Очевидно, что любое существенное изменение данных показателей приведет к драматическим последствиям, которые скажутся на условиях жизни на нашей планете.

Поскольку Солнце играет основополагающую роль в нашей жизни, это является сильнейшей мотивацией для роста количества специалистов, снабжающих астрофизиков инструментарием для изучения процессов внутри Солнца.

4.4. Термодинамика плазмы других инертных газов

Довольно часто термодинамические свойства плазмы более тяжелых инертных газов изучались с использованием модели водородоподобной плазмы, которая учитывает лишь однократную ионизацию (DIENEMANN et al., 1980; ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1984; EBELING et al., 1986a, 1988;

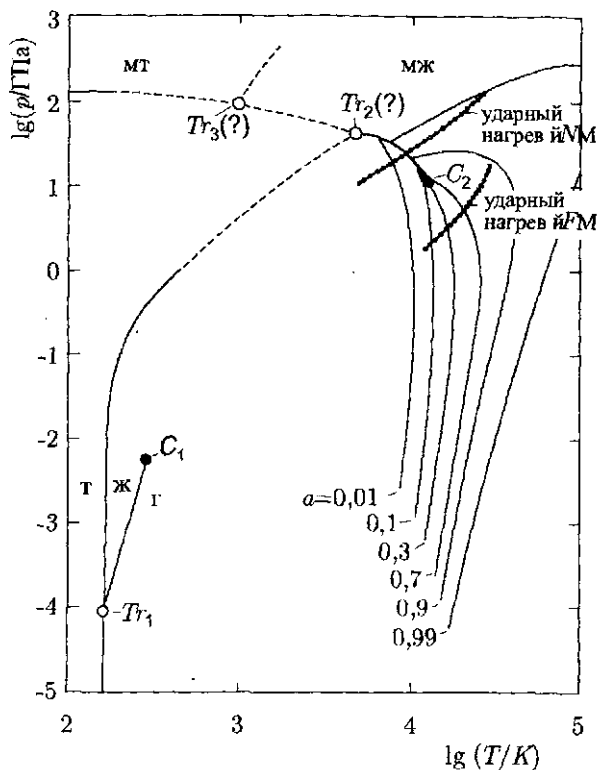


Рис. 4.4.1. Фазы ксенона в плоскости давление–температура, в рамках водородоподобной модели (EBELING et al., 1988; FÖRSTER et al., 1988). Толстыми линиями обозначены фазовые переходы первого рода. Tr_1 – тройная точка между твердой (т), жидкой (ж) и газообразной (г) фазами. C_1 – критическая точка для перехода жидкость–газ. C_2 – критическая точка для плазменного фазового перехода. Пунктирными линиями показаны возможные дополнения к фазовой диаграмме: Tr_2 – тройная точка между фазами твердого диэлектрика, жидкого диэлектрика и металлической жидкости (мж); Tr_3 – тройная точка между металлической твердой (мт), металлической жидкой фазами и фазой твердого диэлектрика. Тонкими линиями показаны области постоянной степени ионизации $\alpha_1 = \bar{z}$. Процесс металлизации при низких температурах описан согласно Россу и МакМахану (1980). Точечным пунктиром обозначены ударные адиабаты, построенные по результатам экспериментов

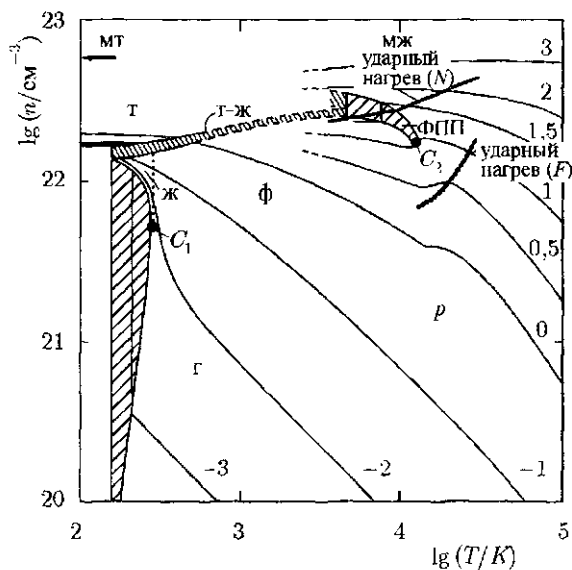


Рис. 4.4.2. Фазы ксенона в плоскости плотность–температура, полученные по модели водородоподобной плазмы. Различают следующие области: т-г – область испарения твердого вещества, ж-г – область сосуществования жидкости и газа, т-ж – область плавления, т – твердое тело, ж – жидкость, г – газ, ф – флюид, п – плазма, ПФП – область сосуществования при плазменном фазовом переходе, мж – металлическая жидкость, мт – металлическое твердое тело. Тонкими линиями показаны изобары, пересекающие область сосуществования. Единицей давления является $\lg(\rho/\text{гПа})$. Стрелкой показана плотность при переходе к металлическому состоянию при $T = 0 \text{ К}$ (согласно Россу и МакМахану, 1980). Точечный пункт соответствует ударно-волновым экспериментам

FÖRSTER et al., 1988; HESS and KAHNBAUM, 1989). Однако такое ограничение едва ли может быть оправдано в широком диапазоне давлений и температур, где атом может потерять более одного электрона под воздействием высокого давления и/или высокой температуры.

Данный недостаток был выявлен еще в ранних работах (ECKER and KRÖLL, 1963; DRAWIN and FELENBOK, 1965; БАЛУЕВ и др., 1970), но интерес к плазме инертных газов с более высокими степенями ионизации возрос, когда появились некоторые новые технические приложения.

Сначала обобщим основные результаты, полученные для одноэлектронной (водородоподобной) модели: плазма инертных газов во многом проявляет себя как водородная плазма, если ионизован лишь один электрон. В частности, это связано с их относительно высокой энергией ионизации. Непосредственно из этого следует возможность существования двух различных критических точек. В первой критической точке, соответствующей переходу газ-жидкость, данные о системе хорошо известны (в пределах $10^1 \dots 10^2$ К и $10^5 \dots 10^7$ Па). Предполагается, что вторая критическая точка должна находиться в пределах области сильного взаимодействия (около $10^4 \dots 10^5$ К и $10^9 \dots 10^{11}$ Па). Соответствующий ей фазовый переход является фазовым переходом первого рода и сопровождается резким изменением массовой плотности и степени ионизации. Этот плазменный фазовый переход (ПФП) является, так сказать, высокотемпературной модификацией хорошо известного перехода диэлектрик-металл.

Ограничимся рассмотрением частного случая инертных газов, а именно, ксенона. Расчет плазмы других инертных газов дает качественно похожие результаты и может быть проведен аналогично. Среди благородных газов ксенон является главным претендентом на плазменный фазовый переход. Результаты экспериментов по статическому сжатию при низких температурах доказывают, что переход диэлектрик-металл происходит при давлении выше 100 ГПа. Росс и МакМахан (ROSS and MC MAHAN, 1980) провели необходимые расчеты и пришли к выводу, что переход происходит при давлении около 130 ГПа. Точная фазовая диаграмма для ксенона при высоких температурах на сегодняшний день еще не построена.

На рис. 4.4.1 и 4.4.2 показана возможная форма фазовой диаграммы ксенона, которая была построена на основе одноэлектронной теории (EBELING et al., 1988; FÖRSTER et al., 1988). Ударноволновые данные получены в различных экспериментах по сжатию из жидкого (N) и газообразного состояний (F). Данные (N) (KEELER et al., 1965; NELLIS et al., 1982) пересекают область неустойчивости ПФП, а данные (F) (МИНЦЕВ, ФОРТОВ, 1979; ЗАПОРОЖЕЦ и др., 1984) лежат за ее пределами, что соответствует исходно низкой плотности.

Термодинамические свойства ксенона, описанные в литературе на сегодняшний день, не дают ясного указания на фазовый переход. Можно ли действительно говорить в данном случае о плазменном фазовом переходе, покажут дальнейшие аккуратные измерения электропроводности или коэффициента отражения ксенона.

Итак, мы кратко обобщили результаты одноэлектронной теории. Принимая во внимание, что данная теория оказывается несостоятельной применительно к областям, в которых ионизируются два или более электронов,

перейдем к рассмотрению многоэлектронной теории. Будем опираться на работу Ферстера и Кальбаума (FÖRSTER and KANLBAUM, 1990), посвященную расчетам свойств равновесной многозарядной газовой плазмы.

Согласно данной работе плотность свободной энергии равна:

$$f = f_{id} + f_{int}, \quad f_{int} = f_{hc} + f_{Coul}. \quad (4.4.1)$$

Вид идеального газовой части был описан в разделах 3.1 и 4.1. Вклад кулоновских взаимодействий вычисляется на основе аппроксимации Якоби–Паде (см. раздел 3.3). Для вычисления вклада твердых сфер f_{hc} мы применяли выражение для произвольных смесей твердых сфер, которое является справедливым и для высоких плотностей (MANSOORI et al., 1971; см. раздел 3.1). Радиусы атомов и ионов выбираются согласно правилу Слэтера (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЦУК, 1989; см. также разделы 6.3 и 6.4):

$$r_z = \frac{a_0}{0,086(I_z/1\text{эВ})^{1/2}}. \quad (4.4.2)$$

Радиус электронов берется равным нулю ($r_e = 0$), что соответствует эффекту исключенного объема.

Решая систему нелинейных уравнений (4.1.7) при фиксированных значениях n_e и T методом Ньютона–Рафсона (КАЛИТКИН, 1978), определяем состав плазмы $\{n_0, \dots, n_Z\}$ в относительных долях $\{\alpha_Z\}$ тяжелых частиц (рис. 4.4.3а-е). В дополнение вычисляется значение среднего заряда \bar{z} тяжелых частиц как обобщенной степени ионизации (рис. 4.4.4), а также значение полного давления p (рис. 4.4.5 и 4.4.6).

Очевидно, что при расчете тяжелых элементов с $Z_{\text{ядр.}} \gg 1$ должно быть ограничено количество учитываемых ионов. Чтобы понять, какие из них существенны, мы исследовали зависимость $(\alpha_0, \dots, \alpha_Z)$, \bar{z} и p от максимального зарядового числа Z при заданной температуре T (рис. 3(а)-(с), 4а-с, 5а-с).

В результате было установлено, что на шкале плотности существует определенный интервал, называемый нами «областью применимости». В пределах данного интервала Δn значения величин не меняются в том случае, если добавить ион с более высоким зарядом $Z + 1$. За пределами интервала, т. е. при более низких или высоких плотностях, их значения оказываются сильно зависящими от Z . При $Z < Z_{\text{min}}$ область применимости исчезает (Z_{min} — функция, зависящая от T). При $Z \geq Z_{\text{min}}$ она неизменно становится шире по мере возрастания значения Z . Согласно эмпирическому правилу выбор значения Z не будет оказывать влияния на результаты

расчетов до тех пор, пока в составе плазмы не начнут преобладать ионы, несущие заряд выше Z .

На рис. 4.4.3 (а)-4.4.3(с) и 4.4.4а-с отражены основные результаты наших расчетов для случая, когда $Z = 1, 2, 3$ и $T = 30000$ К. Это слишком высокая температура, поэтому модель водородоподобной плазмы $Z = 1$ (рис. 4.4.3(а) и 4.4.4а) здесь не применима, поскольку для всех значений плотности $\alpha_1 > 0,85$. И действительно, для $Z = 2$ $\Delta n \cong (2 \cdot 10^{18} \dots 8 \cdot 10^{21})$ см⁻³ (рис. 4.4.3(б) и 4.4.4б), а для $Z = 3$ $\Delta n \cong (1 \cdot 10^{16} \dots 2 \cdot 10^{22})$ см⁻³ (рис. 4.4.3(с) и 4.4.4с). Для наглядности на рис. 4.4.3(б) и 4.4.3(с) область применимости показана стрелкой. В будущем остается ответить на вопрос, существует ли такое максимальное значение Z_{\max} , выше которого значение Δn остается постоянным.

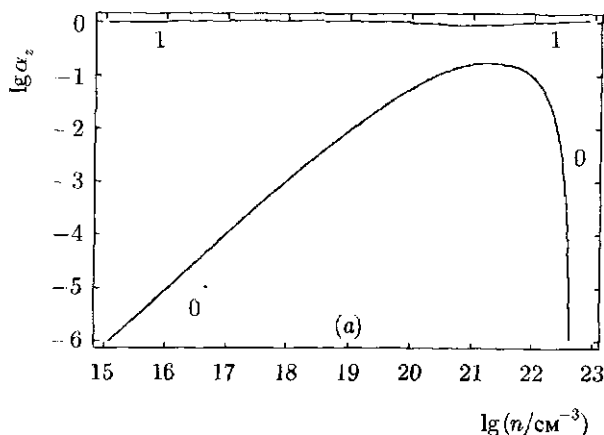


Рис. 4.4.3(а). Зависимость относительных долей α_z тяжелых частиц ($z = 0, 1$) в составе ксенонной плазмы от полной плотности n при $T = 30000$ К. Максимальное зарядовое число $Z = 1$; случай полного взаимодействия

Влияние вклада взаимодействия в выражении для свободной энергии продемонстрировано при такой же температуре и $Z = 3$ (рис. 4.4.3(с)-4.4.3(е), 4.4.4с-е, 4.4.5с-е). На рис. 4.4.3(е) изображен состав идеальной плазмы ($f_{int} = 0$), при низких плотностях состоящий в основном из ионов, с зарядом Z ($\alpha_z \rightarrow \delta_{z,Z}$), а при высоких плотностях — из атомов ($\alpha_z \rightarrow \delta_{z,0}$). Соответственно, средний заряд (рис. 4.4.4е) уменьшается со значения $\bar{z} \cong Z$ до значения $\bar{z} \cong 0$, при этом каждая из сглаженных ступе-

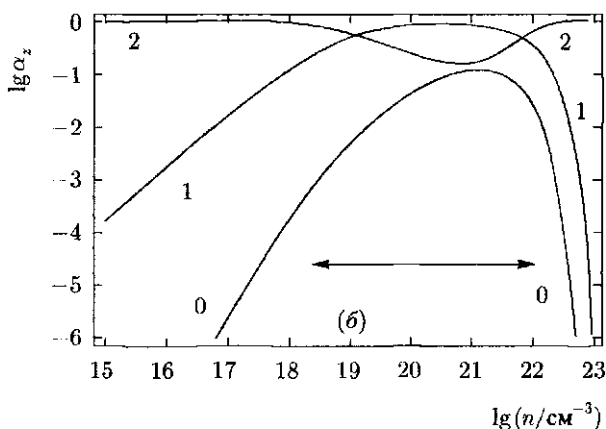


Рис. 4.4.3(б). Относительные доли α_z тяжелых частиц ($z = 0, 1, 2$) в составе ксеноновой плазмы полной плотностью n при $T = 30000$ К. Максимальное зарядовое число $Z = 2$; случай полного взаимодействия. Стрелкой показана область применимости

ней его изменения в указанных пределах указывает на исчезновение соответствующего состояния ионизации. Данный процесс можно также описать аналитически (см раздел 4 1, уравнение (4.1.16)). Кулоновские силы ($f_{mi} = f_{Coul}$) меняют идеальное поведение системы при превышении значения $n \cong 10^{18} \text{ см}^{-3}$ вызывая появление высокозарядных ионов, поскольку корреляционная энергия возрастает, как ($z^p, p \geq 2$). Такая ситуация приводит к образованию «долины слабоионизованных состояний» в промежуточном диапазоне значений плотностей (рис. 4.4.3(d)). В проекции на плоскость \bar{z} от общей плотности — n (рис. 4.4.4) это проявляется в минимумах на кривых a-d. Более того, кулоновское взаимодействие само по себе проявляется в значительном снижении давления (рис. 4.4.5). В дополнение при $n > 10^{21} \text{ см}^{-3}$ проявляются и силы отталкивания со стороны твердых сердцевин ($f_{int} = f_{Coul} + f_{hc}$). Этот эффект делает более предпочтительным существование ионов с более высоким зарядом из-за их меньшего размера (рис. 4.4.3(с) и 4.4.4с) и приводит к резкому росту давления (рис. 4.4.5с).

Наконец, Фёрстер и Кальбаум (FÖRSTER and KAHNLAUM, 1990) рассчитали последовательность изотерм давления для $Z = 3$ и четырех температур с учетом полного взаимодействия (рис. 4.4.6). Ниже критической температуры T_c (кривая III) кулоновские силы приводят к отрицательному

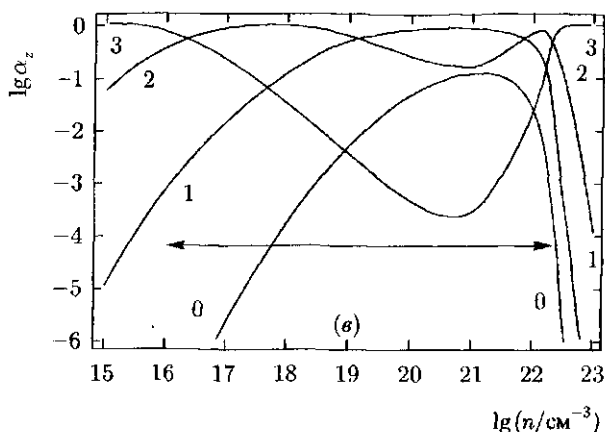


Рис. 4.4.3(с). Относительные доли α_z тяжелых частиц ($z = 0, 1, 2, 3$) в составе ксеноновой плазмы полной плотностью n при $T = 30000$ К. Максимальное зарядовое число $Z = 3$; случай полного взаимодействия. Стрелкой показана область применимости

наклону кривой ($\partial p / \partial n < 0$), так что появляется ван-дер-ваальсова петля (кривые I и II). Данное явление обычно связано с плазменным фазовым переходом из слабоионизированного состояния в высокопроводящее жидкое состояние.

Грубая оценка, которая дает $T_c \cong 50\,000$ К, показывает, что для $Z = 3$ наша модель предсказывает плазменный фазовый переход при такой температуре, при которой для случаев $Z = 1, 2$ (рис. 4.4.5а и б) будет наблюдаться лишь плавный переход. Помимо сдвига критической точки ПФП в сторону более высоких температур, многократная ионизация, по идее, также должна привести к расширению области сосуществования. Однако для надежного вычисления фазовых диаграмм необходимо, чтобы область сосуществования полностью лежала в пределах области применимости. Данное условие не выполняется для случая $Z = 3$, поэтому задача построения надежной фазовой диаграммы ксенона, в которой бы учитывалось явление возможной многократной ионизации, является предметом будущих исследований.

Простейшим примером плазмы с многократной ионизацией является гелий ($Z_{\text{ядр.}} = 2$). При $Z = Z_{\text{ядр.}}$ область применимости занимает весь диапазон значений плотностей, так что расчеты фазовых переходов становятся возможными (см. предыдущий раздел 4.3).

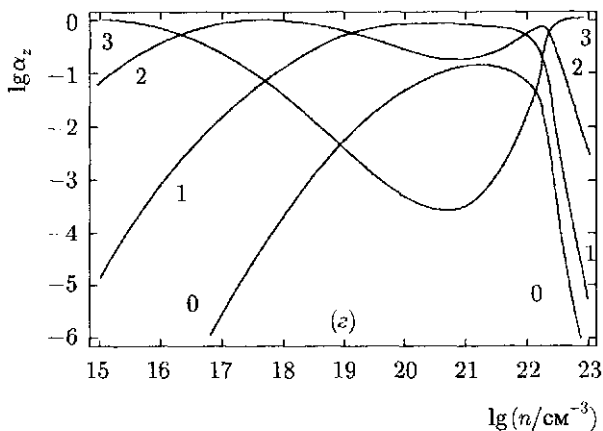


Рис. 4.4.3(d). Зависимость относительных долей α_z тяжелых частиц ($z = 0, 1, 2, 3$) в составе ксеноновой плазмы от полной плотности n при $T = 30000$ К. Максимальное зарядовое число $Z = 3$; случай кулоновского взаимодействия

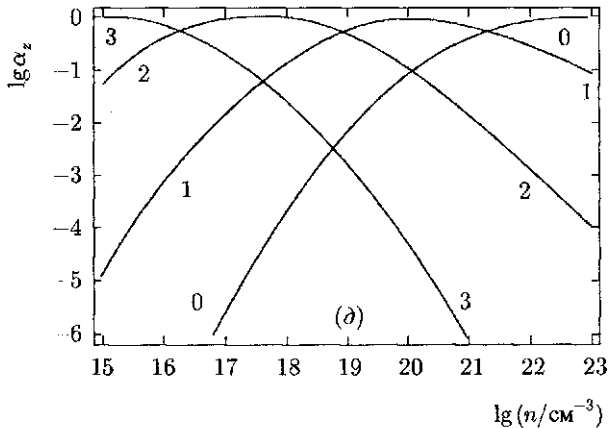


Рис. 4.4.3(e). Зависимость относительных долей α_z тяжелых частиц ($z = 0, 1, 2, 3$) в составе ксеноновой плазмы от полной плотности n при $T = 30000$ К. Максимальное зарядовое число $Z = 3$; взаимодействий нет (идеальный случай)

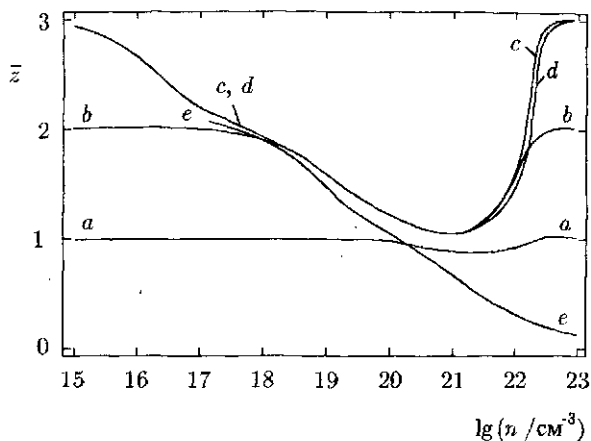


Рис. 4.4.4. Зависимость среднего заряда \bar{z} тяжелых частиц ($z = 0, 1, 2, 3$) в составе ксеноновой плазмы от полной плотности n при $T = 30000$ К. См. рис. 3(а)-(е) для описания случаев а-е

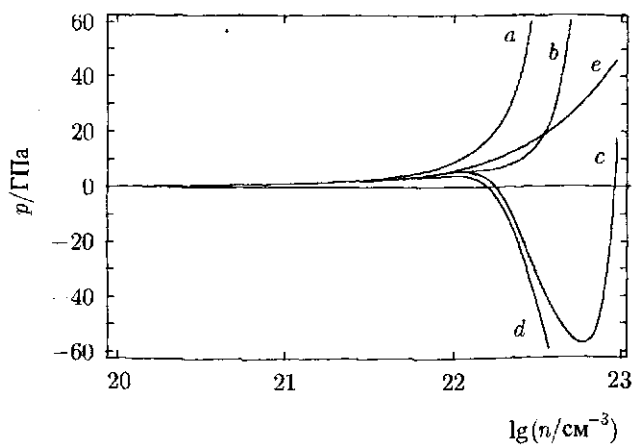


Рис. 4.4.5. Зависимость давления p ксеноновой плазмы от общей плотности n при $T = 30000$ К. См. рис. 3(а)-(е) для описания случаев а-е

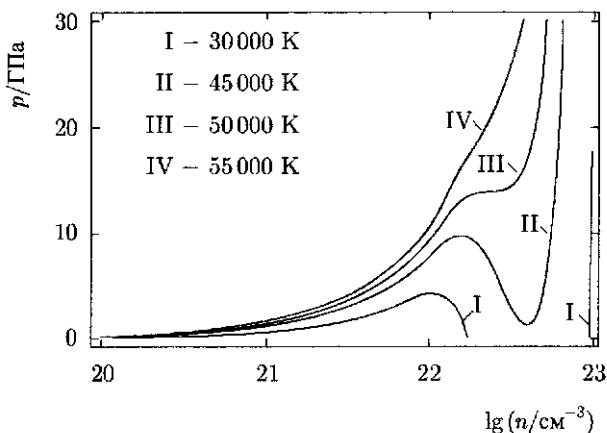


Рис. 4.4.6. Зависимость давления p ксеноновой плазмы от общей плотности n для четырех разных температур

4.5. Сравнение химической модели и модели среднего атома

В данном разделе мы сравним методы расчета ионизационного равновесия на основе модели среднего иона (среднего заряда тяжелых частиц) и точного состава плазмы. В основном будем опираться на работу Фёрстера и др. (FÖRSTER et al., 1991c), в которой особое внимание уделяется плотной плазме меди. Состояние «среднего» иона и детальный компонентный состав как важнейшие характеристики плазмы меди, являются предметом особого интереса, например, при изучении явлений катодного пятна (ANDERS and ANDERS, 1988, 1989; HESS, 1990), их знание также необходимо для расчета термодинамических, транспортных и оптических свойств плазмы. В рамках теоретического описания плотной плазмы меди необходимо учитывать такие эффекты неидеальности, как снижение границы непрерывного спектра и ионизация давлением. Для этого можно использовать, к примеру, химическую модель (разделы 3.2 и 4.1-4), на основе которой мы изучали уравнение состояния и плазменные фазовые переходы, или модель усредненного атома (RICKERT, 1989; RICKERT and MEYER-TER-VEHN, 1990), разработанную не так давно для расчета коэффициентов поглощения излучения. Сначала кратко охарактеризуем обе модели.

В рамках химической модели плазма рассматривается как совокупность частиц различных сортов, каждая из которых характеризуется полным зарядом, энергетическим спектром, массой и эффективным радиусом. Считается, что плазма состоит из тяжелых частиц (атомов и ионов) и свободных электронов с плотностями чисел частиц n_z и n_e , соответственно. Равновесные свойства такой системы описываются на основе свободной энергии Гельмгольца F , которая выбирается в качестве основного термодинамического потенциала. Следуя общей методике, которую мы подробно рассматривали в предыдущих разделах, F складывается из идеального газовых составляющих для тяжелых частиц и электронов (согласно статистике Больцмана и Ферми–Дирака, соответственно), вкладов кулоновского взаимодействия и близкодйствующего отталкивания. Учет кулоновского взаимодействия осуществляется на основе аппроксимации Якоби–Паде, которая заключается в интерполяции между дебаевским законом с квантовыми поправками и выражениями для классической многокомпонентной ионной решетки, экранированной сильно вырожденным электронным газом. Вклад близкодйствующего отталкивания представляется точным выражением для произвольной смеси твердых сфер различных радиусов. Для сравнения с моделью среднего атома мы используем радиус водородоподобной орбитали внешних связанных электронов атомов или ионов в основном состоянии. Существование частиц конечного размера приводит к уменьшению объема в идеальном газе вклада электронов (принцип запрета Паули). Статистические суммы тяжелых частиц подчиняются правилу Бриллюэна–Планка–Ларкина. Энергетический спектр (невозмущенные уровни и статистические веса) описывается согласно данным Ш. Мур (MOORE, 1952), для $z > 2$ рассматриваются лишь основные энергетические уровни (РАДЦИГ, СМЕРНОВ, 1986). Детальный компонентный состав плазмы можно определить, если решить систему Z связанных уравнений Саха $\mu_z = -\mu_{z-1} + \mu_e$, которые соответствуют процессам ионизации–рекомбинации $i_z \longleftrightarrow i_{z+1} + e$ при условии электронейтральности. Значение химических потенциалов $\{\mu_z\}$ и μ_e определяется как обычно, например, $\mu_e = \partial F / \partial N_e$.

В рамках модели среднего атома (RICKERT, 1989; RICKERT and MEYER-TER-VEHN, 1990) плазма описывается как совокупность тяжелых частиц плотностью $n_{\bar{z}} = n$ в состоянии средней степени ионизации и среднего возбуждения и свободных электронов плотностью $n_e = \bar{z}n_{\bar{z}}$. Такое описание равнозначно замещению различных атомных структур, с зарядом z , одной средней \bar{z} -зарядной структурой (средним атомом). Подоболочки (n, l) такой усредненной структуры характеризуются электронными числами заполнения P_{nl} согласно статистике Ферми–Дирака и радиусом r_{nl} , соответствующим водородоподобной модели с экранированным

зарядом ядра. Значения чисел заполнения P_{nl} зависят от одноэлектронных энергий $\{E_{nl}\}$ и, наоборот, каждое значение E_{nl} определяется полным набором $\{P_{nl}\}$, что требует самосогласованного решения, в результате чего получаем:

$$\bar{z} = Z - \sum_{nl} P_{nl}. \quad (4.5.1)$$

Из всех существующих методов приближенного расчета энергий мы выбрали водородоподобную модель с экранированным ядром и расщеплением энергетических уровней относительно орбитального момента l (PERROT, 1989), соответствующим невозмущенной структуре энергетических уровней изолированных многоэлектронных атомов. Сдвиги энергетических уровней в плазме вследствие кулоновского взаимодействия рассчитываются на основе модели ионной сферы (HUEBNER, 1986). При высоких плотностях значение r_{nl} может быть выше, чем радиус ионной сферы, что ведет к перекрытию подболочек соседних структур. Чтобы избежать подобного нарушения принципа Паули, соответствующую степень вырождения $2(2l+1)$ плавно устремляют к нулю (ZIMMERMANN, 1980). В рамках химической модели аналогичный эффект достигается за счет вклада твердых сфер в свободную энергию. Более подробно модель экранированного водорода мы рассмотрим в разделе 6.2.

В литературных источниках (HUEBNER, 1986) для анализа изменений в структуре, характеризующейся определенной степенью ионизации и возбуждения, по сравнению со средней конфигурацией, предлагается использовать биномиальное распределение. Поскольку на данный момент нас интересует лишь зарядовый состав, можно воспользоваться простой формулой:

$$\alpha = \binom{Z}{z} \left(\frac{\bar{z}}{Z}\right)^z \left(1 - \frac{\bar{z}}{Z}\right)^{Z-z}. \quad (4.5.2)$$

На рис. 4.5.1 и 4.5.2 представлены численные результаты для химической модели, а на рис. 4.5.3 и 4.5.4 — для модели среднего атома. Детальный состав плазмы в общем случае довольно сложен, как это видно на рис. 4.5.1, тем не менее в нем всегда преобладают два или три типа частиц. При низких плотностях (вплоть до $n \approx 10^{19}$ при $T = 10^5$ К) плазма проявляет идеальные свойства, при средних значениях плотности (до 10^{22} см $^{-3}$ и этой же температуре) на состав плазмы значительное воздействие оказывает кулоновское взаимодействие, а при высоких плотностях существенным также становится ближкодействующее отталкивание.

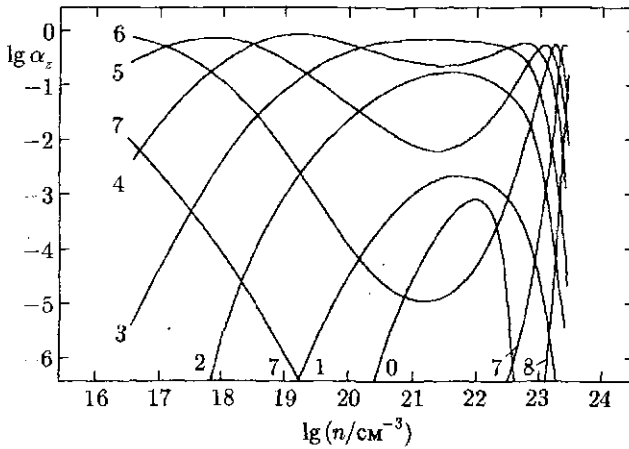


Рис. 4.5.1. Зависимость относительных долей $\{\alpha_z\}$ от плотности n в химической модели для температуры $T = 10^5$ К. Кривые помечены зарядовым числом z

Вследствие кулоновского взаимодействия средняя степень ионизации (рис. 4.5.2 и 4.5.3) характеризуется наличием минимума, что ведет к образованию «долины слабоионизированных состояний» (см. раздел 4.4). С увеличением температуры начало влияния взаимодействия и, следовательно, минимальное значение \bar{z} сдвигается в сторону более высоких значений плотности. Эффект последовательного исчезновения слабоионизированных состояний из-за воздействия кулоновских сил и высоких плотностей известен как ионизация давлением. Для химической модели характерны более или менее проявляющиеся ступени изменения \bar{z} (рис. 4.5.2) в том случае, если отношение температуры к соответствующим энергиям ионизации не превышает определенного значения.

На рис. 4.5.4 представлена иная возможность продемонстрировать температурную ионизацию и ионизацию давлением. Скачки \bar{z} проявляются при тех температурах где достигаются устойчивые неоподобные и гелиеоподобные электронные конфигурации при $\bar{z} = 19$ и $\bar{z} = 27$, соответственно. Для плотности $n = 10^{22}$ см $^{-3}$ на ионизацию давлением указывает пересечение кривых \bar{z} .

Для проверки справедливости применения биномиального распределения относительных долей $\{\alpha_z\}$ в составе плазмы мы рассчитали их значения по модели среднего заряда. Для непосредственного сравнения полученной оценки (рис. 4.5.5) с действительным составом плазмы (рис. 4.5.1) значение \bar{z} мы взяли из химической модели.

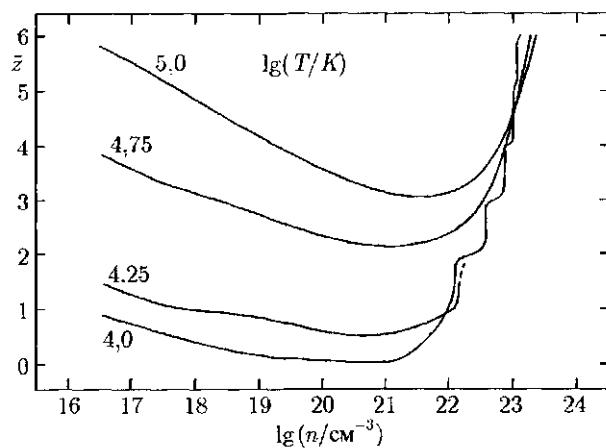


Рис. 4.5.2. Зависимость среднего заряда \bar{z} от плотности n в химической модели для четырех разных температур

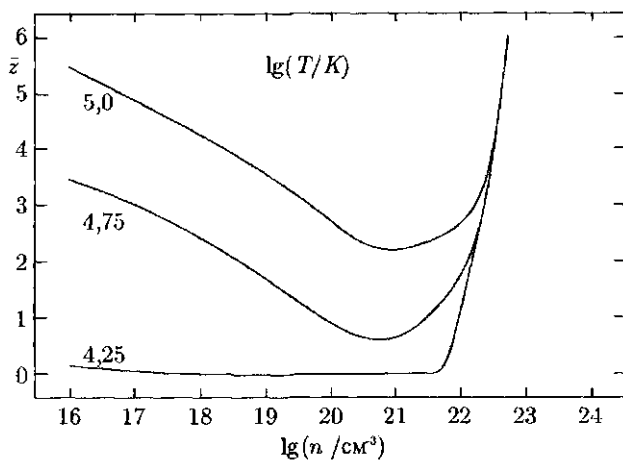


Рис. 4.5.3. Зависимость среднего заряда \bar{z} от плотности n в модели среднего атома для четырех разных температур

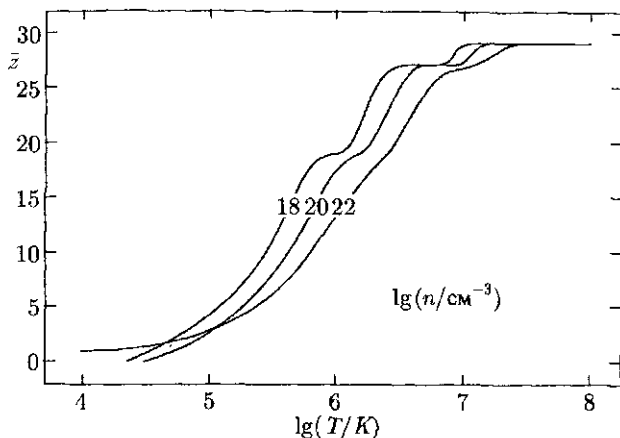


Рис. 4.5.4. Зависимость среднего заряда \bar{z} от температуры в модели среднего атома для трех значений плотности числа тяжелых частиц

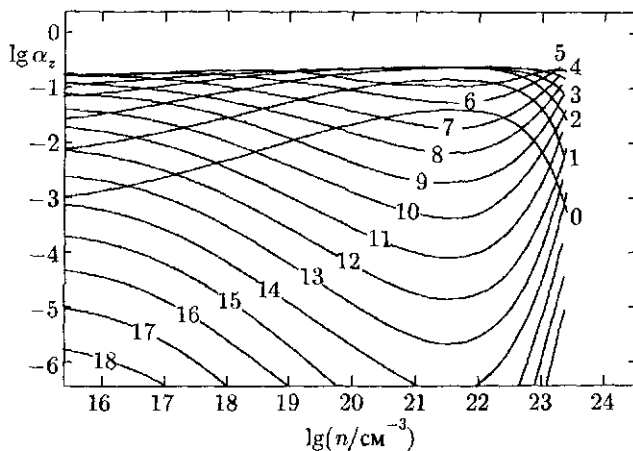


Рис. 4.5.5. Биномиальное распределение относительных долей $\{\alpha_z\}$ в зависимости от плотности n . Доли рассчитаны из значения \bar{z} , полученного по модели среднего атома (иона) для температуры $T = 10^5$ К (см. рис. 4.5.1). Кривые помечены зарядовым числом z

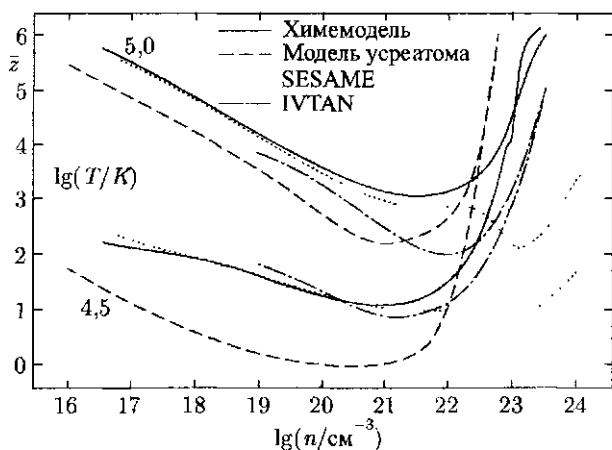


Рис. 4.5.6. Зависимость среднеионизованного состояния \bar{z} от плотности n для двух температур: сравнение химической модели (сплошные линии), модели усредненного атома (пунктирные линии), данных SESAME (точечные линии), и данных IVTAN из таблицы 8.3 (штрихпунктирные линии)

На первый взгляд, оба распределения проявляют схожие свойства: последовательности сортов частиц для заданной температуры почти совпадают. Однако значения относительных долей недоминирующих частиц преувеличены, т. е. биномиальное распределение, как правило, оказывается слишком плоским. Также в нем не учитываются индивидуальные свойства частиц (например, разные энергии ионизации), от которых зависит реальное распределение.

Из рис. 4.5.6 видно, что химическая модель и модель среднего атома дают качественно одинаковые результаты для среднего заряда. Более низкие значения \bar{z} в модели среднего атома объясняются тем, что водородоподобная модель с экранированием и расщеплением энергетических уровней относительно орбитального момента l для первых ионизованных состояний объясняются более высокими значениями энергии ионизации. С химической моделью мы также сравнили результаты расчета по табличным данным для меди: по таблицам SESAME для группы T-4 (HOLIAN, 1983) и таблицам IVTAN (таблица 8.3). Несмотря на то, что таблицы SESAME применяются довольно широко, нам не известны детали их физического обоснования. Исключая область ионизации давлением, наблюдается почти

полное соответствие результатов расчета по химической модели и таблицам SESAME. Минимум $n \approx 10^{23} \text{ см}^{-3}$ на кривых SESAME имеет нефизический характер, который можно объяснить несоответствием различных теорий, включенных в SESAME. Таблицы ИВТАИ построены на основе полуэмпирического подхода, при котором химическая модель модифицируется с учетом экспериментальных данных.

В разделе 6.4 будет приведено обоснование теории, лежащей в основе этой модификации. Согласие этих результатов с данными химической модели можно назвать удовлетворительным и для более низких температур, особенно в том, что касается общей формы области слабоионизированных состояний. В худшем случае погрешность составляет 30%.

Согласно Фёрстеру и др. (FÖRSTER et al., 1990c) можно сделать вывод, что состав равновесной медной плазмы хорошо описывается в рамках химической модели, тогда как биномиальное распределение является всего лишь достаточно грубой аппроксимацией. Возможно, наблюдающееся количественное расхождение удастся снизить, если усовершенствовать атомную физику, лежащую в основе модели среднего атома.

4.6. Сдвиги энергетических уровней и спектральных линий для водородоподобных связанных состояний

Для астрофизических приложений и задач, связанных с современными плазменными технологиями большой интерес представляет систематическое исследование сдвигов энергетических уровней и спектральных линий. Конкретными примерами может служить физика Солнца и больших планет, а также явления вблизи электродов в дугах, мощных импульсных разрядах и плазме, созданной ударными волнами, взрывающимися проволочками, высокоинтенсивными лазерами или пучками ионов (YOU and ICHIMARU, 1986; BOTTCHER et al., 1987; KUNZE, 1987; VITEL, 1987; MENDEZ and NIEMALA, 1982; STOREY and HUMMER, 1988; ROGERS et al., 1988). К тому же, разработка рентгеновских лазеров также тесно связана с изучением очень плотной и высокоионизованной плазмы, в которой главную роль играют водородоподобные связанные состояния. До недавнего времени все исследования эффектов неидеальности в многокомпонентной плазме ограничивались рассмотрением ионов, несущих только один протонный заряд (ZIMMERMANN et al., 1978). Согласно положениям, описанным в разделе 3.5, мы постараемся развить теорию для плазменных систем с произвольным зарядом и высокой плотностью, в которой бы учитывались эффекты Паули (KILIMANN and EBELING, 1990; BORNATH et al., 1990).

Для упрощения задачи ограничимся рассмотрением энергетических состояний одноэлектронных структур, т.е. в первом к водороду периодом системы элементов или ионами несущими лишь один электрон (например, He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , ..., C^{6+} и т.д.). С особым вниманием исследуем высшие энергетические уровни, для которых требуется много свободного пространства (ридберговские атомы или ионы) и которые сильно подвержены влиянию эффектов блокировки Паули при высоких плотностях.

Взаимодействие связанных состояний, состоящих из электронов с зарядом $(-e)$ и ядра (ионов) с зарядом $(+Ze)$, с окружающей плазмой значительно возрастает по мере увеличения квантовых чисел, поскольку возбужденные состояния занимают большую часть доступного пространства. Таким образом, возбужденные состояния в плотной плазме могут приводить к проявлению эффектов неидеальности. Особый интерес для нас представляет их влияние на сдвиги энергетических уровней, исследование которых является первоочередной задачей при изучении оптических переходов (GRIEM, 1968; КЛИМОНТОВИЧ, 1982).

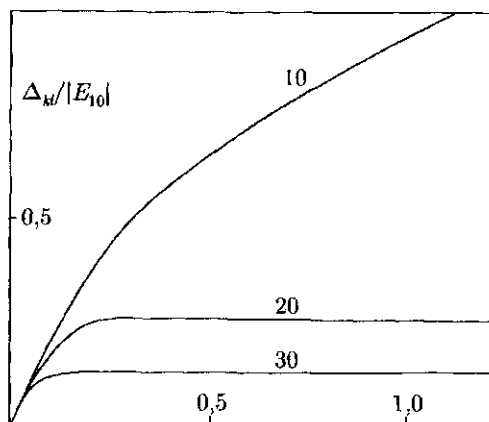


Рис. 4.6.1. Зависимость сдвига спектральной линии от параметра Мотта

Сначала остановимся на теории, изложенной в разделе 3.5. В ее основе лежит приближение, согласно которому энергетический сдвиг уровня является универсальной для всех элементов функцией, зависящей исключительно от параметра Мотта

$$\frac{\Delta_{st}}{|E_{st}|} = f_{st}(X), \quad X = \kappa \alpha_0^Z. \quad (4.6.1)$$

На рис. 4.6.1 показаны три случая (для главных квантовых чисел $s = 1, 2, 3$ и $l = 0$) монотонного роста значения сдвига энергетического уровня в зависимости от параметра Мотта (корня плотности). В конечном итоге сдвиг стремится к постоянной величине, что соответствует слиянию энергетического уровня (s, l) с непрерывным спектром. На рис. 4.6.2 можно проследить, как меняются энергетические уровни в зависимости от параметра Мотта.

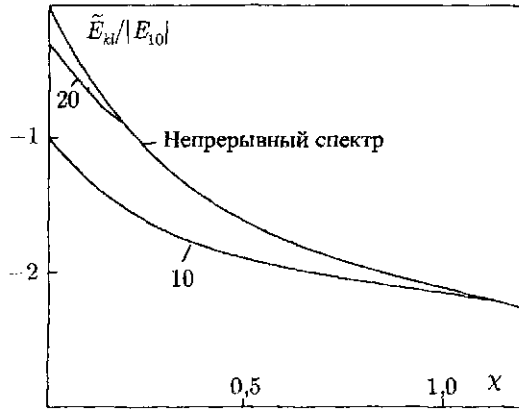


Рис. 4.6.2. Зависимость энергетических уровней для C VI от параметра Мотта и их слияние с непрерывным спектром

Как и в разделе 3.5, рассмотрим невырожденную плазму, состоящую из электронов с плотностью числа свободных электронов n_e и ядер с зарядом Z и плотностью $n_Z = n$. В этом случае уравнение Бете-Голдстоуна будет иметь вид (KRAEFT et al., 1990):

$$\left\{ \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_i} + \Delta_e + \Delta_i - \tilde{E} \right\} \psi(p_1, p_2, \tilde{E}) - \sum_q V_{ie}(q) \psi(p_1 - q, p_2 + q, \tilde{E}) = \\ = \sum_q V_{ie}(q) [f_e(p_1) + f_i(p_2)] \psi(p_1, p_2, \tilde{E}) + \\ + \sum_q [V^s(q) - V(q)] \psi(p_1 - q, p_2 + q, \tilde{E}). \quad (4.6.2)$$

Считая правую часть уравнения поправкой, получим по теории возмущений

в статическом приближении:

$$\tilde{E}_{sl} = E_{sl} + \Delta_e + \Delta_i + \Delta_{sl}. \quad (4.6.3)$$

Вклады в энергию, фигурирующие в данном выражении, можно выразить через производные от вклада взаимодействия (*int*) в выражении для свободной энергии *f*:

$$\Delta_e = \frac{\partial}{\partial n_e} f_{int}, \quad \Delta_i = \frac{\partial}{\partial n_z} f_{int}, \quad (4.6.4)$$

Последнее слагаемое в уравнении (4.6.3) характеризует так называемый относительный сдвиг:

$$\begin{aligned} \Delta_{sl} = & \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^3 p d^3 \bar{p} [V^s(p - \bar{p}) - V(p - \bar{p})] \psi_{sl}^*(p) \psi_{sl}(\bar{p}) + \\ & + \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^3 p d^3 \bar{p} [f_e(p) + f_i(p)] V(p - \bar{p}) \psi_{sl}^*(p) \psi_{sl}(\bar{p}). \end{aligned} \quad (4.6.5)$$

В разделе 3.5 говорилось, что за относительный сдвиг энергетического уровня (*s, l*) можно взять значение математического ожидания для двух энергетических вкладов, первый из которых — это разность между кулоновским и дебаевским потенциалами, а второй — кинетическая энергия.

Для низкой плотности относительный сдвиг равен:

$$\begin{aligned} \Delta_{sl} = Z e^2 \kappa \left\{ 1 - \frac{\tilde{\kappa} \langle \rho \rangle_{sl}}{2} + \frac{\tilde{\kappa}^2 \langle \rho^2 \rangle_{sl}}{6} - \frac{\tilde{\kappa}^3 \langle \rho^3 \rangle_{sl}}{24} + \dots \right\} + \\ + k_B T (\tilde{n}_e + \tilde{n}_z) A_{sl}. \end{aligned} \quad (4.6.6)$$

Здесь $\langle \rho^n \rangle_{sl}$ — математические ожидания $\rho = r/a_0$ для орбиты, соответствующей собственному состоянию (*s, l*). Матрица A_{sl} равна:

$$A_{sl} = \frac{1}{(2\pi a_0)^3 k_B T} \int d^3 p \left(\frac{p^2}{2\mu} - E_{sl} \right) \exp \left(\frac{-p^2}{2\mu k_B T} \right) \frac{\psi_{sl}^*(p) \psi_{sl}(p)}{(2\pi \mu k_B T)^{3/2}}, \quad (4.6.7)$$

а значения безразмерных параметров определяются следующим образом:

$$\tilde{\kappa} = \kappa a_0, \quad \tilde{n}_e = n_e a_0^3, \quad \tilde{n}_z = n_z a_0^3. \quad (4.6.8)$$

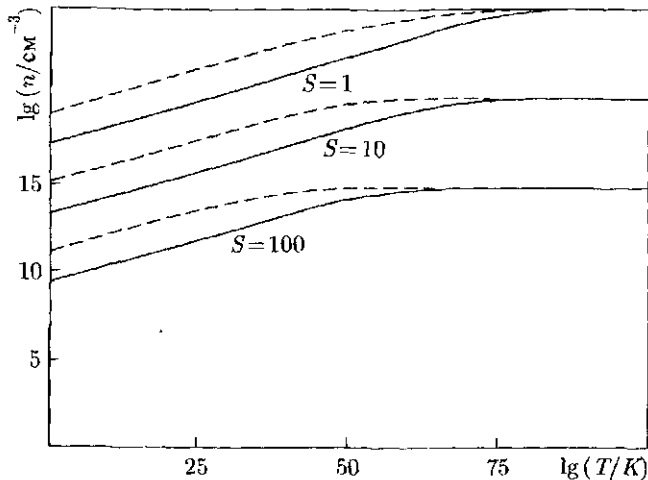


Рис. 4.6.3. Граничные линии (кривые Мотта) на плоскости плотность-температура, которые соответствуют моментам исчезновения энергетических уровней с главным квантовым числом 1, 10 и 100, соответственно. Низкотемпературный участок каждой граничной линии обусловлен дебаевским экранированием, а высокотемпературный участок -- эффектами блокировки Паули. Сплошные линии соответствуют атомам водорода, а пунктирные линии -- водородоподобным ионам углерода

Для численной оценки можно воспользоваться аппроксимацией Якоби-Падде (BORNATH et al., 1990):

$$\Delta_{sl} = \frac{Z\epsilon^2 \kappa_{\kappa}(1 + a_{sl} \tilde{\kappa}_{\kappa}) + k_B T \tilde{n}_e (1 + Z^{-1}) A_{sl}}{1 + b_{sl} \tilde{\kappa}_{\kappa} + 2a_{sl} \tilde{\kappa}_{\kappa}^2 s^2 + k_B T \tilde{n}_e (1 + Z^{-1}) A_{sl} |E_{sl}|^{-1}},$$

$$a_{sl} = \frac{\frac{1}{4} \langle \rho \rangle_{sl}^2 - \frac{1}{6} \langle \rho \rangle_{sl}^2}{s^2 D},$$

$$b_{sl} = \frac{1}{2} \langle \rho \rangle_{sl} + a_{sl}, \quad D = 1 - \frac{\langle \rho \rangle_{sl}}{2s^2}.$$
(4.6.9)

Данные выражения применяются даже шире, чем уравнение (3.5.12), поскольку они оказываются справедливыми и в том случае, когда нарушается неравенство (3.5.33). Эти поправки существенны при высоких темпера-

турах и плотностях. На рис. 4.6.3 показаны результаты для энергетических уровней водорода и углерода.

На сегодняшний день еще не существует завершенной теории, в которой бы учитывались сдвиги Паули, поэтому вышеописанный теоретический подход следует считать лишь первым шагом к ее построению.

4.7. Кинетика ионизации водородоподобной плазмы

Рассмотрим невырожденную плазму, которая состоит из свободных электронов с плотностью числа частиц n_e и ионов водорода H^+ с плотностью n_i . Предположим, что существуют связанные состояния $k = 1, 2, \dots$ с заселенностями (числами частиц на уровне k на единицу объема) n_k . Уравнения скорости изменения заселенности энергетических уровней возбужденного атома в водородной плазме будут иметь вид (EBELING and LEIKE, 1991):

$$\begin{aligned} \frac{dn_k}{dt} = & -\alpha_k n_k n_e + \beta_k n_i n_e^2 - \sum_{m=k+1}^{n_{\max}} \alpha_{km} n_k n_e - \sum_{m=1}^{k-1} \beta_{km} n_k n_e + \\ & + \sum_{m=1}^{k-1} \alpha_{mk} n_m n_e + \sum_{m=k+1}^{n_{\max}} \beta_{mk} n_m n_e, \end{aligned} \quad (4.7.1)$$

где α_k и β_k — константа скорости ионизации и константа трехчастичной рекомбинации для уровня k , соответственно; α_{km} и β_{km} — скорости возбуждения и девозбуждения с уровня k до уровня m , соответственно. n_{\max} — количество включенных уровней. Излучением для случая плотной плазмы можно пренебречь. Вследствие электронейтральности имеем:

$$n_e = n_i. \quad (4.7.2)$$

Из условия сохранения числа частиц для изоходной плазмы однородной массовой плотности,

$$n_i + \sum_{k=1}^{n_{\max}} n_k = n = \text{const}, \quad (4.7.3)$$

здесь n — общая плотность тяжелых частиц.

Эбелинг и Килиманн (EBELING and KILIMANN, 1989) предположили, что в плотной термической плазме константы перехода на более высокий энергетический уровень экспоненциально зависят от энергии ионизации,

тогда как процессы перехода с верхних на нижние уровни лишь слабо зависят от плотности, поэтому в первом приближении этой зависимостью можно пренебречь, что не противоречит квантово статистическим результатам Климонтовича (КЛИМОНТОВИЧ, 1980, 1982), Кремпа и др. (KREMP et al., 1989).

Неидеальные константы скорости можно записать в виде (см. раздел 3.6):

$$\alpha_k = \alpha_k^{id} \exp\left(\frac{\Delta_k}{k_B T}\right), \quad (4.7.4)$$

$$\alpha_{km} = \alpha_{km}^{id} \exp\left(\frac{\Delta_k - \Delta_m}{k_B T}\right), \quad (4.7.5)$$

$$\beta_k = \beta_k^{id}, \quad (4.7.6)$$

$$\beta_{km} = \beta_{km}^{id}. \quad (4.7.7)$$

Здесь Δ_k — снижение энергии ионизации уровня k из-за наличия
(I) динамической собственно-энергетической части;
(II) обменной собственно-энергетической части;
(III) динамически экранированного кулоновского взаимодействия
(IV) заполнения фазового пространства.

Значения идеальных констант ионизации и возбуждения выбираем согласно работе DRAEWIN and EMARD (1977) для водородоподобного спектра энергетических уровней. Константа ионизации с уровня k равна:

$$\alpha_k^{id} = \frac{8\pi\alpha_0^2 I^2}{|F_k|^2} f_k \xi_k \left(\frac{2k_B T}{\pi m_e}\right)^{1/2} u_k \psi_1(u_k, \beta), \quad (4.7.8)$$

где

$$u_k = \frac{|E_k|}{k_B T} = \frac{Z^2 I}{k^2 k_B T}, \quad \beta(Z) \approx 1 + \frac{Z-1}{Z+1}, \quad (4.7.9)$$

$$\psi_1(u_k, \beta) = \int_{t=u_k}^{\infty} \left(1 - \frac{u_k}{t}\right) \exp(-t) \ln \frac{1,25\beta t}{u_k} dt. \quad (4.7.10)$$

Здесь I — энергия ионизации водорода из основного состояния (13,6 эВ), ξ_k — количество энергетически эквивалентных электронов на уровне k , k_k — сила осциллятора для связанно-свободных переходов ($f_1 = 0,665$,

$f_2 = 0,71$, $f_3 = 0,81$, $f_4 = 0,94$ и $f_{\geq 5} = 1$), Z — эффективный заряд ядер и E_k — энергетический уровень в водородоподобном спектре,

$$|E_k| = \frac{Z^2 I}{k^2}. \quad (4.7.11)$$

Константы возбуждения для связанно-связанных переходов с нижнего на верхний уровень равны:

$$\alpha_{km}^{id} = 8\pi\alpha_0^2 \left(\frac{I}{E_m - E_k} \right)^2 f_{km} \left(\frac{2k_B T}{\pi m_e} \right)^{1/2} u_{km} \times \\ \times [\psi_1(u_{km}, \beta) + C_{km} \exp(-u_{km})], \quad (4.7.12)$$

где

$$u_{km} = \frac{|E_m| - |E_k|}{k_B T} = \frac{Z^2 I \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{k^2} \right)}{k_B T}, \quad m > k \quad (4.7.13)$$

$$C_{km} = \begin{cases} 0,3, & k = 1, m = 2 \\ 0,2, & \text{если } k = 1, m \neq 2 \\ 0,1, & k \neq 1 \end{cases} \quad (4.7.14)$$

Параметр f_{km} характеризует силу оспешивателя при переходе с нижнего уровня k на верхний уровень m . Для водорода $Z = 1$, $\xi_k = 1$ и $f_{12} = 0,4162$, $f_{13} = 0,0791$, $f_{14} = 0,0290$, $f_{15} = 0,0139$, $f_{23} = 0,637$, $f_{24} = 0,119$, $f_{25} = 0,044$, $f_{34} = 0,841$, $f_{35} = 0,150$, $f_{45} = 1,038$ и т. д.

Расчет сдвигов энергетических уровней мы приводили в разделе 3.5. Сейчас воспользуемся следующей формулой:

$$\Delta_{sl} = \varepsilon^2 \kappa \left\{ 1 - \frac{1}{2} \kappa \langle r \rangle_{sl} + \frac{1}{6} \kappa^2 \langle r^2 \rangle_{sl} - \right. \\ \left. - \frac{1}{24} \kappa^3 \langle r^3 \rangle_{sl} + f_{sl} (\kappa a_0)^4 \right\} \quad (4.7.15)$$

$$f_{sl} = \frac{1}{2k^2 X_{sl}} - 1 + \frac{X_{sl} \langle \rho \rangle_{sl}}{2} - \frac{X_{sl} \langle \rho^2 \rangle_{sl}}{6} + \frac{X_{sl} \langle \rho^3 \rangle_{sl}}{24}$$

$$X_{sl}^4$$

при условии, что κa_0 не превышает значения X_{sl} . В противном случае $\Delta_{sl} = E_{sl}$, так что эффективная энергия ионизации $I_{sl} = |E_k| - \Delta_{sl}$ стремится к нулю из-за перехода Мотта. Значения X_{sl} были вычислены Ролджерсом и Грабоски (ROGERS and GRABOSKE, 1970). Средние значения

радиусов атома r , r^2 и r^3 обозначены параметрами $\langle r \rangle_{sl}$, $\langle r^2 \rangle_{sl}$ и $\langle r^3 \rangle_{sl}$, соответственно. $\rho = r/a_0$, а κ — обратный дебаевский радиус, равный

$$\kappa = \left(\frac{4\pi e^2(n_e + n_i)}{k_B T} \right)^{1/2}. \quad (4.7.16)$$

На основе уравнений (4.7.4), (4.7.8) и (4.7.10) для разных значений температуры мы рассчитали константу ионизации α_1 для основного энергетического уровня как функцию от плотности свободных электронов. На рис. 4.7.1 показаны результаты расчета. Кривые продолжены вплоть до значения плотности, соответствующей переходу Мотта, потому что, когда уровень сливается с непрерывным спектром, константы ионизации не имеют смысла. Для сравнения здесь приведены также результаты Шлангеса и Борната (SCHLANGES and BORNATH, 1989), полученные с использованием дебаевского приближения. Надо сказать, что данное приближение ведет к слишком высоким значениям константы ионизации при больших плотностях.

Решая систему дифференциальных уравнений (4.7.1) в условиях (4.7.2) и (4.7.3), мы рассчитали скорость изменения заселенности возбужденных атомных уровней. Опираясь на работу Роджерса и Грабоски (ROGERS and GRABOSKE, 1970), при температуре $T = 30000$ К мы ограничились рассмотрением пяти, трех или двух атомных уровней для значений плотности $n = 10^{18}$ (10^{20} , 10^{21}) см^{-3} , соответственно. Оставшиеся уровни к этому моменту уже сливаются с непрерывным спектром.

Мы начали с релаксационных процессов в случае полностью ионизованной плазмы. Результирующие кривые приведены на рис. 4.7.2-4. Пунктиром обозначены кривые, соответствующие идеальной плазме, когда все значения $\Delta_{sl} = 0$.

Из рисунков видно, что относительная заселенность основных энергетических уровней для неидеальной плазмы порой в четыре раза меньше, чем в случае идеальной плазмы. При низких плотностях время релаксации для возбужденных уровней гораздо меньше, чем для основного энергетического уровня, как для идеальной, так и неидеальной плазмы. Это находится в согласии с работой Бэйтса и др. (BATES et al., 1962), которые изучали только идеальную плазму. Они установили, что плазма ведет себя как идеальная до тех пор, пока не будет достигнуто значение плотности свободных электронов, равное 10^{18} (10^{20}) см^{-3} , при температуре $T = 16000$ (64000) К. При более высоких плотностях (рис. 4.7.3 и 4.7.4) заселенность имеет иную зависимость от времени. Уровни одновременно достигают состояния теплового равновесия. При высоких плотностях плазмы заселен-

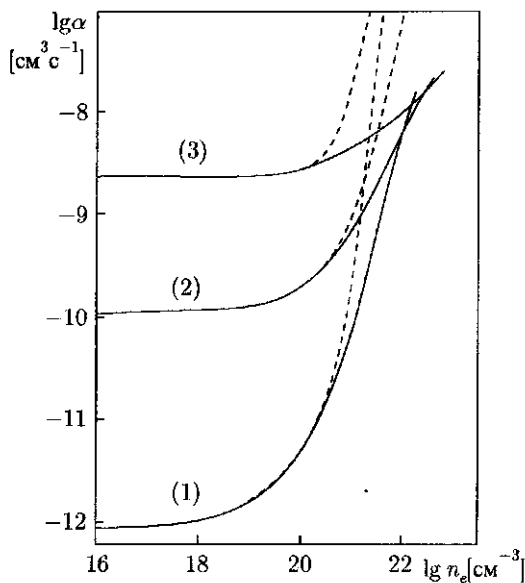


Рис. 4.7.1. Зависимость константы ионизации основного энергетического уровня от плотности свободных электронов, построенная для разных значений температуры: (1) $T = 16\,000$ К, (2) $T = 30\,000$ К, (3) $T = 64\,000$ К. Сплошными линиями изображены кривые, построенные по описываемой здесь методике, а пунктирными линиями — результаты Шлангеса и Борната (SCHLANGES and BORNATH, 1989)

ность возбужденных уровней превышает равновесную заселенность в 10 раз (в случае идеальной плазмы) и в 6 раз (в случае неидеальной плазмы). Данное явление связано с тем, что при высоких плотностях вследствие процесса рекомбинации заселенность уровней меняется пропорционально значению n_e^3 . В неидеальной плазме данный эффект подавляется из-за возрастания константы ионизации.

Можно наблюдать инверсию заселенности уровней, которая пропадает тем быстрее, чем выше значение плотности.

Для сравнения на рис. 4.7.5 показан процесс релаксации, если стартовать с низкотемпературного распределения Больцмана. Такая ситуация может возникнуть при резком нагревании первоначально холодного газа (плазмы). И снова наблюдаем, что в процессе релаксации значения заселенности уровней в идеальной и неидеальной плазме отличаются между собой в 1,5 раза.

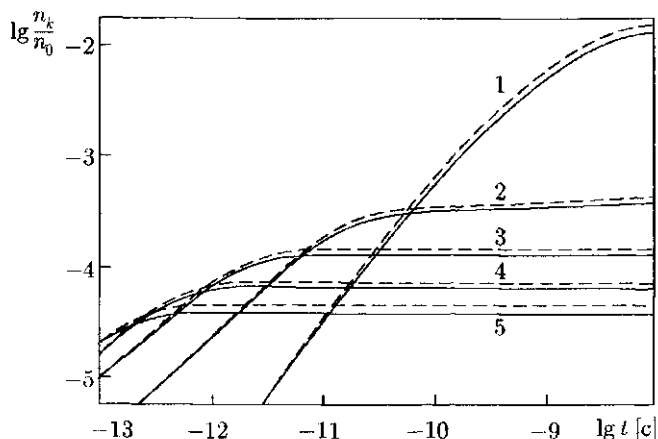


Рис. 4.7.2. Зависимость относительной заселенности атомных уровней от времени для температуры $T = 30\,000$ К и плотности $n = 10^{16}$ см $^{-3}$. Пунктирные линии соответствуют идеальной плазме, сплошные линии – неидеальной плазме. Кривые помечены главными квантовыми числами энергетических уровней. В момент времени $t = 0$ плазма считается полностью ионизованной

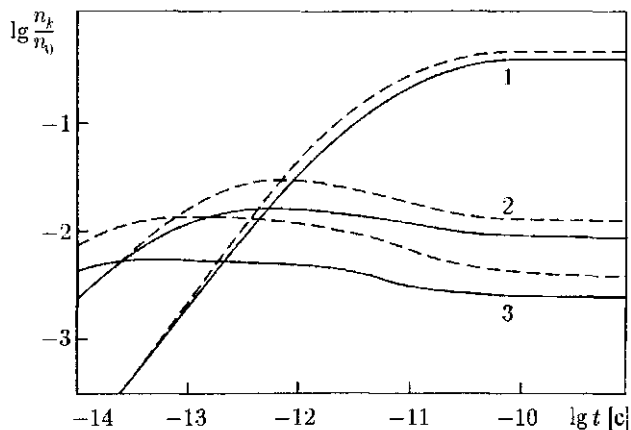


Рис. 4.7.3. Зависимость относительной заселенности атомных уровней от времени для температуры $T = 30\,000$ К и плотности $n = 10^{20}$ см $^{-3}$. Пунктирные линии соответствуют идеальной плазме, сплошные линии – неидеальной плазме. Кривые помечены главными квантовыми числами энергетических уровней. В момент времени $t = 0$ плазма считается полностью ионизованной

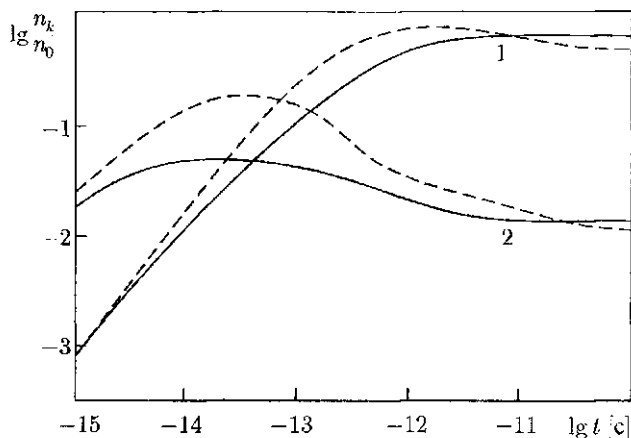


Рис. 4.7.4. Зависимость относительной заселенности атомных уровней от времени для температуры $T = 30\,000$ К и плотности $n = 10^{21}$ см $^{-3}$. Пунктирные линии соответствуют идеальной плазме, сплошные линии — неидеальной плазме. Кривые помечены главными квантовыми числами энергетических уровней. В момент времени $t = 0$ плазма считается полностью ионизованной

Подведем итог. Мы обсудили влияние эффектов неидеальности на изменение заселенности возбужденных атомных уровней в плотной водородной плазме. Обсуждаемые эффекты лишь незначительно зависят от температуры. При более высоких температурах, однако, равновесное состояние достигается быстрее за счет более высокой кинетической энергии частиц.

4.8. Фронты ионизации и явления нуклеации

В предыдущем разделе речь шла о кинетике процессов ионизации и рекомбинации в однородной водородной плазме. Теперь приступим к изучению неоднородного распределения частиц (FEBLING et al., 1989). На первых порах будем пренебрегать динамикой заполнения возбужденных атомных уровней, так что в результате получим неполное описание рассматриваемой проблемы.

Мы уже знаем (см. раздел 3.6), что применение аппроксимации амбиполярной диффузии сводит описание изменений плотности частиц к одному уравнению, которое, например, для плотности свободных электронов

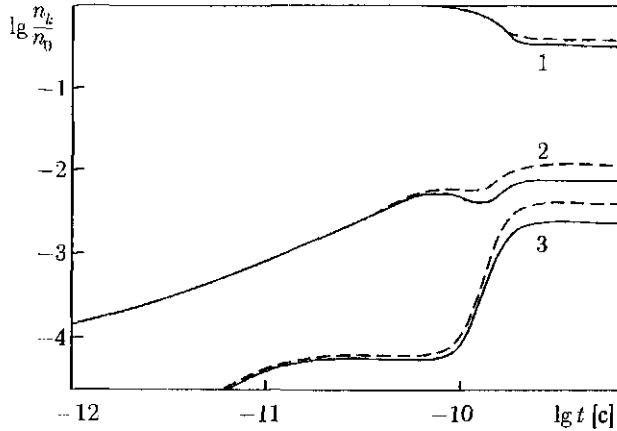


Рис. 4.7.5. Зависимость относительной заселенности атомных уровней от времени для температуры $T = 30\,000$ К и плотности $n = 10^{20}$ см $^{-3}$. Пунктирные линии соответствуют идеальной плазме, сплошные линии — неидеальной плазме. Кривые помечены главными квантовыми числами энергетических уровней. Считается, что момент времени $t = 0$ при температуре $T = 1\,000$ К характеризуется распределением Больцмана

имеет вид:

$$\frac{\partial n_e(r, t)}{\partial t} = w(n_e, n, T) + \nabla D \nabla n_e(r, t), \quad (4.8.1)$$

$$w(n_e, n, T) = \alpha_{id} \exp\left(-\frac{\Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0}{k_B T}\right) (n - n_e) n_e - \beta_{id} n_e^3. \quad (4.8.2)$$

Данное уравнение обычно называют реакционно-диффузионным уравнением (LBELING and FEISTEL, 1982; VASILEV et al., 1987). В реакционно-диффузионных системах возможны такие явления структурообразования, как разделение фаз (бистабильность), распространение фронтов и явления нуклеации.

Определим основные свойства уравнения (4.8.1), рассмотрев сначала одномерный случай и постоянную (идеальную) диффузию. Имеем:

$$\frac{\partial n_e(x, t)}{\partial t} = w(n_e) + D \frac{\partial^2 n_e(x, t)}{\partial x^2}. \quad (4.8.3)$$

Значения плотности числа тяжелых частиц $n = n_0 + n_1$ и температуры T , выступающих в качестве параметров системы, остаются постоянными. Для упрощения, вместо $w(n_e, n, T)$, будем писать $w(n_e)$. Тогда нули функции $w(n_e)$ относительно плотности электронов n_e будут определять поведение системы. В прикладных химических задачах выделяют два стандартных случая (ПОЛАК, МИХАЙЛОВ, 1983), которые показаны на рис. 4.8.1.

(I) Функция имеет два нуля (устойчивое и неустойчивое стационарные состояния): как правило, можно наблюдать переход из неустойчивого состояния в устойчивое, а состояния отделяются движущимся фронтом.

(II) Функция имеет три нуля (два устойчивых состояния, разделенных одним неустойчивым стационарным состоянием): как правило, система разделяется на две фазы, которые отделяются друг от друга движущимся или неподвижным фронтом.

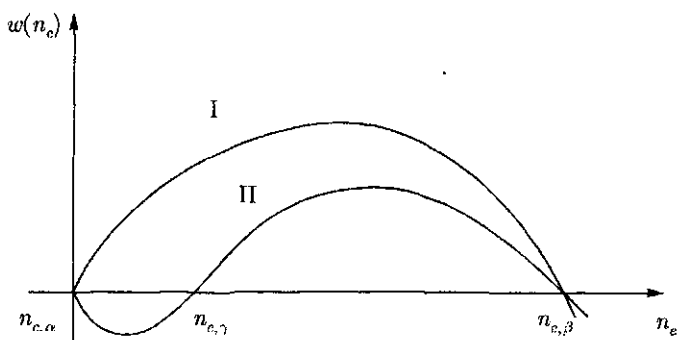


Рис. 4.8.1. Схематичное изображение функции источника $w(n_e)$ с двумя (I) и тремя (II) нулями

Граничные условия на бесконечном участке соответствуют исчезновению градиентов ∇n_e при таких значениях $n_{c,\lambda}$, при которых функция-источник равна нулю, $w(n_{c,\lambda}) = 0$.

Теперь рассмотрим стационарные решения уравнения (4.8.3). Если для плотности электронов ввести понятие профиля стационарного фронта $\bar{n}_e(\xi)$, который зависит исключительно от автомодельной переменной $\xi = x - vt$, проблема сводится к решению уравнения:

$$-v\bar{n}'_e = w(\bar{n}_e) + D\bar{n}''_e, \quad (4.8.4)$$

где штрихом (') обозначены производные по ξ . Граничные условия таковы:

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} \bar{n}_e(\xi) = n_{e,\alpha}, \quad \lim_{\xi \rightarrow -\infty} \bar{n}_e(\xi) = n_{e,\beta}. \quad (4.8.5)$$

Заменяя $y(\bar{n}_e) = \bar{n}'_e(\bar{n}_e)$, переходим от уравнения (4.8.4) к выражению:

$$-vy = w(\bar{n}_e) + Dyy'. \quad (4.8.6)$$

Граничные условия для уравнения (4.8.6) следующие:

$$y(n_{e,\alpha}) = 0, \quad y(n_{e,\beta}) = 0. \quad (4.8.7)$$

В случае существования двух нулей функции $w(n_e)$ стационарные решения для фронтов можно получить только тогда, когда скорость фронта превышает определенное минимальное значение, $v \geq v_{\min}$. Действительно, уравнение (4.8.4) можно рассматривать как уравнение движения частицы массой D в потенциале U ,

$$U(\bar{n}_e) = \int_0^{\bar{n}_e} w(n_e) dn_e, \quad (4.8.8)$$

где \bar{n}_e — координата частицы, а v — коэффициент трения. Профиль фронта \bar{n}_e соответствует пути, которое прошла частица от максимума потенциала при $\bar{n}_e = n_{e,\beta}$ до седлообразной точки $n_{e,\alpha}$. Только если трение v достаточно высокое, частица остановится в точке $\bar{n}_e = n_{e,\alpha}$.

Первым данную проблему пытались решить Колмогоров и др. (КОЛМОГОРОВ и др., 1937), а год спустя — Зельдович и Франк-Каменецкий (ЗЕЛЬДОВИЦ, ФРАНК-КАМЕНЕЦКИЙ). Если значение первой производной $\partial w / \partial n_e$ для нелинейной функции $w(n_e)$ изменяется монотонно, нижнюю границу v_{\min} скорости можно выразить через производную функции-источника в неустойчивой стационарной точке:

$$v_{\min} = v_0, \quad (4.8.9)$$

$$v_0 = 2 \left(D \frac{\partial W}{\partial n_e} \Big|_{n_e = n_{e,\alpha}} \right)^{1/2}. \quad (4.8.10)$$

Если значение первой производной изменяется не монотонно, первый переход седло-узел возможен лишь при условии $v_{\min} > v_0$. Неустойчивость однородного состояния $n_e = n_{e,\alpha}$ ведет к существованию области значений

скорости, $v_{\min} \leq v < \infty$. Колмогоров и др. (КОЛМОГОРОВ и др., 1937) показали, что лишь одно из этих стационарных решений ($v = v_{\min}$) является более или менее устойчивым. Начиная с произвольного профиля фронта, асимптотический вид всегда будет совпадать с тем, что соответствует минимальной скорости v_{\min} . Полноценный обзор рассматриваемой математической задачи содержится в монографии Зельдовича и др. (ZELDOVICH et al., 1985).

В случае существования трех нулей функции (случай II) имеется множество стационарных решений (VASILEV et al., 1987), среди которых единственным устойчивым решением является монотонный фронт, соединяющий два устойчивых стационарных состояния. Свойства системы, т.е. функция $w(n_e)$, однозначно определяют форму и скорость данного фронта. Решая задачу на собственные значения (4.8.6)–(4.8.7), можно получить форму и скорость фронта.

В общем случае эту задачу на собственные значения можно решить только численным методом, однако иногда аналитическое решение может быть получено путем замены функции $w(n_e)$ кусочно-линейной функцией. Другой удобной аппроксимацией является аппроксимация многочленом:

$$w(n_e) = -q(n_e - n_{e,\alpha})(n_e - n_{e,\beta})(n_e - n_{e,\gamma}). \quad (4.8.11)$$

При этом скорость можно получить из выражения:

$$v^0 = \frac{1}{2}(2Dq)^{1/2}(2n_{e,\gamma} - n_{e,\alpha} - n_{e,\beta}), \quad (4.8.12)$$

а профиль фронта — из соотношения:

$$n_e(x, t) = n_{e,\alpha} + (n_{e,\beta} - n_{e,\alpha}) \left\{ 1 + \exp\left(\frac{4(x - vt)}{1}\right) \right\}^{-1}. \quad (4.8.13)$$

До сих пор мы рассматривали одномерный случай, т.е. плоские фронты. Уравнения (4.8.12)–(4.8.13) можно обобщить для d -мерного случая и неоднородной локальной кривизны фронта $K(r)$:

$$v(K) = v^0 - (d - 1)DK, \quad (4.8.14)$$

$$n(r, t) = n_{e,\alpha} + \frac{n_{e,\gamma} - n_{e,\alpha}}{1 + \exp\left(\frac{4(Nr - v^0t + (d - 1)DKt)}{1}\right)}, \quad (4.8.15)$$

где N — вектор нормали к поверхности.

В особых условиях, когда

$$\int_{n_{e,\alpha}}^{n_{e,\beta}} w(n_e) dn_e = 0, \quad (4.8.16)$$

фронт, соединяющий два устойчивых состояния, может находиться в состоянии покоя, можно наблюдать сосуществование двух фаз. Условие (4.8.16) для неподвижных фронтов с учетом полиномиальной аппроксимации (4.8.11) принимает вид:

$$n_{e,1} + n_{e,3} = 2n_{e,2}. \quad (4.8.17)$$

В случае I фронт возникает спонтанно. Однородное распределение $n_e(r) \equiv n_{e,\alpha}$ неустойчиво, и, пока не установится локально устойчивое состояние $n_{e,\beta}$, малые возмущения будут расти. После этого между двумя состояниями (фазами) образуется фронт, который распространяется по системе. В случае II однородное состояние $n_e(r) \equiv n_{e,\alpha}$ (или $n_e(r) \equiv n_{e,\beta}$, соответственно) устойчиво, и малые возмущения гасятся. Закритические флуктуации, например, образование закритических капель новой фазы, необходимы для запуска перехода. Чтобы оценить размер критической капли, предположим, что она имеет сферическую форму радиусом $R(t)$. Для случая, когда фронт является сферическим ($d = 3$), мы из уравнения (4.8.14) получим следующее выражение для эффективной скорости ($K = R^{-1}$):

$$v = v^0 - \frac{2D}{R} = v^0 \left(1 - \frac{R_{crit}}{R} \right), \quad (4.8.18)$$

$$R_{crit} = \frac{2D}{v^0}. \quad (4.8.19)$$

Из уравнения (4.8.18) следует, что закритические капли новой фазы радиусом $R > R_{crit}$ будут увеличиваться, тогда как докритические капли радиусом $R < R_{crit}$ исчезнут. Таким образом, параметр R_{crit} можно рассматривать как радиус критической флуктуации.

Теперь применим нашу теорию к водородной плазме. Для этого необходимо определить сдвиги энергетических уровней, фигурирующие в уравнении (4.8.2). Мы знаем (см. раздел 3.6), что снижение энергии ионизации $\chi = \Delta_e + \Delta_1 - \Delta_0$ можно выразить через вклады в химические потенциалы за счет взаимодействия. Согласно нашей предыдущей методике, использованной в разделе 4.2, воспользуемся следующей аппроксимацией:

$$\chi = \chi_{Coul} + \chi_{hc}, \quad (4.8.20)$$

$$\chi = \mu_e^{Coul} + \mu_1^{Coul} - \mu_0^{Coul}, \quad \chi_{hc} = \mu_e^{hc} + \mu_1^{hc} - \mu_0^{hc}. \quad (4.8.21)$$

Для вычисления вклада кулоновского взаимодействия предпочтительнее использовать аппроксимацию Якоби–Паде, которая близка к известным аналитическим выражениям как для предела высоких, так и низких температур и/или плотностей, и ведет лишь к незначительным погрешностям в промежуточной области (см. раздел 4.2). Эффекты близкого действующего взаимодействия, которые оказывают особо сильное влияние в области высоких плотностей, учтены в рамках модели твердых сфер согласно выражениям Мансури и др. (MANSOORI et al., 1971) (см. раздел 3.1). В нашем случае это будет выглядеть так:

$$\chi_{hc} = -k_B T \left(2 \ln(1 - \nu) + \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1 - \eta)^3} + \frac{2n_e \eta}{n_0(1 - \eta)} \right), \quad (4.8.22)$$

$$\eta = \frac{4\pi n}{3} R^3.$$

Параметр η характеризует отношение занятого объема к общему объему, а параметр R -- радиус атомов водорода как твердых сфер. Константа закона действующих масс $K(T)$ выражена в соответствии с правилом Бриллюэна–Планка–Ларкина. В дополнение учтены некоторые поправки за счет статистики Ферми (см. уравнение (3.6.33)). Более строгий учет влияния эффектов вырождения на константы скорости в плазме мы оставим на будущее.

Итак, на основе вышеприведенных приближений были исследованы стационарные состояния для водородной плазмы. На рис. 4.8.2 показано, как с повышением температуры функция реакции $w(n_e, n, T)$ с двумя нулями трансформируется в функцию с четырьмя нулями, а затем снова в функцию с двумя нулями. На рис. 4.8.3 и 4.8.4 изображены бифуркационные диаграммы для стационарных состояний. На рис. 4.8.3 температура постоянна, а плотность числа тяжелых частиц n изменяется. Рис. 4.8.4 отражает обратную ситуацию.

Рис. 4.8.5 представляет собой плоскость плотность–температура, на которой показана область двух устойчивых состояний (четырех стационарных состояний) внутри области одного устойчивого состояния (двух стационарных состояний).

В критической точке данные о системе следующие (EBELING et al., 1989):

$$T_c = 14750 \text{ К}, \quad n_c = 1,4 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}, \quad n_{e,c} = 5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}. \quad (4.8.23)$$

Итак мы изучили вопрос о стационарных решениях. В случае идеальной или неидеальной плазмы функция-источник $w(n_e, n, T)$ имеет два

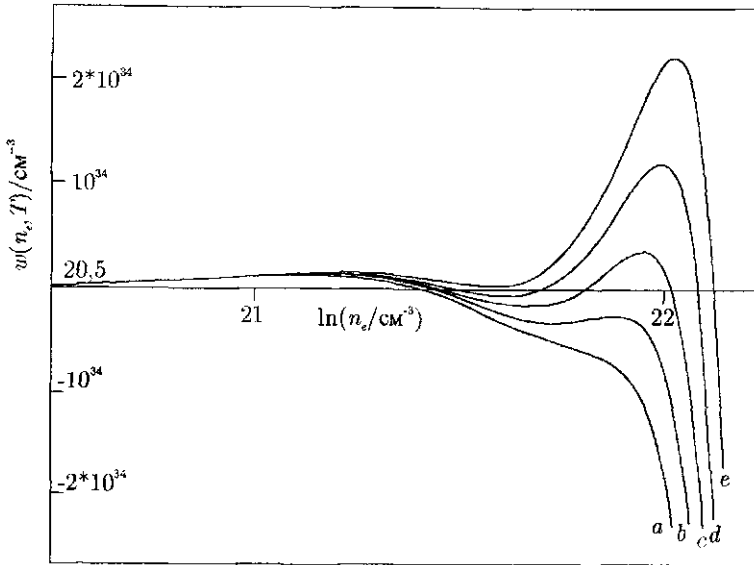


Рис. 4.8.2. Зависимость функции $w(n_e)$ для нескольких температур: а — 14580 К, б — 14590 К, с — 14600 К, д — 14610 К, е — 14620 К. Значение плотности числа тяжелых частиц постоянно и равно $1,439 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$

нуля: $n_{e,0} = 0$ (атомный газ) и $n_{e,1} = 0$ (ионизационное равновесие). Видим, что обычно для плазмы характерно одно устойчивое состояние. Плазма переходит в состояние термодинамического равновесия, которое описывается уравнением Саха для неидеального случая. Если этот процесс берет начало с атомного газа, то должен образоваться движущийся фронт ионизации. Нижнюю границу для скорости фронта можно оценить из уравнения (4.8.10):

$$v = 2 \left[n D \alpha_{id} \exp \left(- \frac{\chi_{hc}}{k_B T} \right) \right]^{1/2}. \quad (4.8.24)$$

Отметим, что при нулевой плотности электронов кулоновская составляющая для χ отсутствует. Такая ситуация может возникнуть при резком нагревании неионизованного газа.

В очень редких случаях, когда плотность особенно высока, возникает четыре стационарных состояния. При этом можно одновременно наблюдать оба случая (I и II), которые мы описывали в начале раздела. Помимо фронта

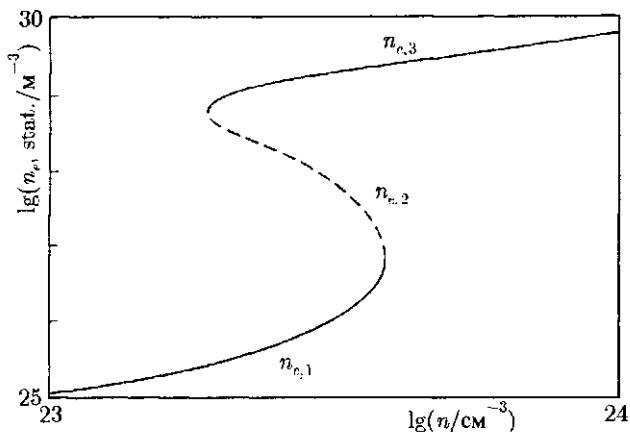


Рис. 4.8.3. Стационарные состояния при фиксированной температуре в 10000 К. Устойчивые состояния $n_{e,1}$ и $n_{e,3}$ изображены сплошной линией, неустойчивое состояние $n_{e,2}$ — пунктиром

релаксации между атомным газом и первым стационарным состоянием, может образоваться второй фронт, который соединяет два устойчивых стационарных состояния (см. рис. 4.8.6). Профиль и соответствующая скорость фронта могут быть вычислены из решения задачи на собственное значение (4.8.6)–(4.8.7). На рис. 4.8.7 представлен один из примеров (BONITZ et al., 1989).

Условие Максвелла (4.8.16) для неподвижных фронтов выполняется для единственного значения плотности числа тяжелых частиц при каждой заданной температуре. Таким образом, на плоскости плотность-температура (рис. 4.8.5) условие Максвелла выполняется на линии, выходящей из критической точки. Выше этой линии фронт движется в сторону фазы с более низкой степенью ионизации $n_{e,1}$, ниже линии по мере продвижения фронта происходит расширение пространства, занятого данной фазой.

Очевидно здесь существует связь с плазменным фазовым переходом. Можно было бы предположить, что данные о системе в критической точке для обоих явлений должны совпадать. Отличие значений, приведенных нами в разделе 4.2 для фазового перехода в плазме (уравнение (4.2.11)) от значений, фигурирующих в настоящем разделе (уравнение (4.8.23)) связаны с тем, что в оригинальных работах Эбелинга и Рихерта (EBELING and RICHERT, 1985a,b), а также Эбелинга и др. (EBELING et al., 1989) ис-

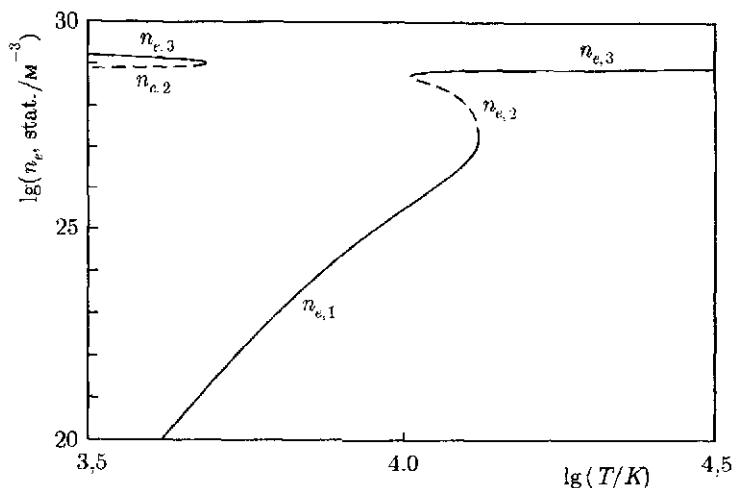


Рис. 4.8.4. Стационарные состояния при фиксированной плотности тяжелых частиц, $n = 1,9 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Устойчивые состояния $n_{e,1}$ и $n_{e,3}$ изображены сплошной линией, неустойчивое состояние $n_{e,2}$ — пунктиром

пользовалось иное значение для радиуса твердых сфер водорода. Однако заметим, что плазменный фазовый переход — это явление, связанное с термодинамическим равновесием, которое при докритических температурах ведет к разделению двух равновесных фаз с разной степенью ионизации и массовой плотностью. Явление же, описываемое в данном разделе, связано с неравновесной плазмой и ведет в общем случае к образованию движущихся фронтов с разными степенями ионизации, но одинаковой массовой плотностью. Однако при специальном выборе параметров фронт может покоиться, т. е. две фазы сосуществуют. В этом случае можно говорить о сходстве между сосуществующими фазами при термодинамическом равновесии и явлении, описываемом в данном разделе. Эта точка зрения подтверждается сходством критических данных. Однако, поскольку в описываемом нами кинетическом подходе используются дополнительные приближения (касающиеся амбиполярности диффузии и постоянного значения полной плотности), мы не ожидаем полного совпадения параметров. Взаимосвязь между данными явлениями является предметом будущих исследований.

Зависимость коэффициента диффузии от плотности ведет к значительным вариациям характеристик диффузионных процессов. В дебаевском приближении значение коэффициента диффузии монотонно уменьшается

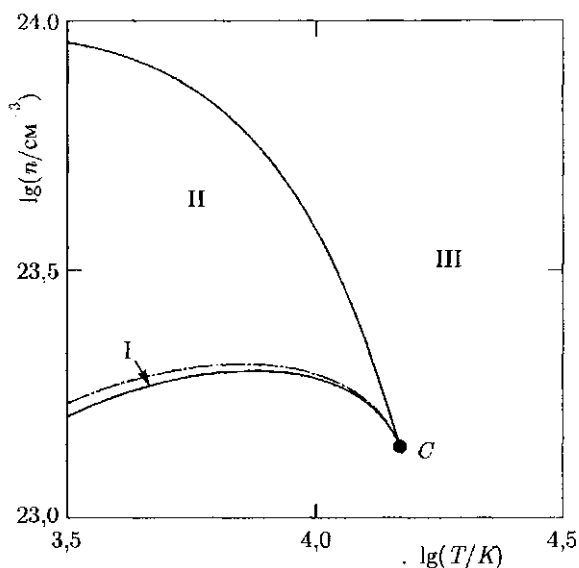


Рис. 4.8.5. Область двух устойчивых состояний (I-II) внутри области одного устойчивого состояния (III). Сплошными линиями показана граница области двух устойчивых состояний. Штрихпунктирная линия соответствует случаю, когда выполняется условие Максвелла, т. е. фронт, соединяющий равновесные состояния $n_{e,1}$ и $n_{e,3}$, находится в состоянии покоя. В области I распространение фронта ведет к расширению пространства, занятого фазой $n_{e,1}$, и уменьшению пространства, занятого фазой $n_{e,3}$. В области II ситуация обратна. С обозначает критическую точку

по мере увеличения плотности электронов. При этом удлиняется время перехода к стационарному профилю. Профиль плотности деформируется таким образом, что диффузия во всем пространстве становится настолько высокой, насколько возможно. Если, к примеру, граничная концентрация частиц при $D = \text{const}$ остается постоянной, профиль принимает форму прямой линии. В дебаевской плазме данная линия образует дугу в области низкой электронной плотности, т. е. смещается в сторону больших значений $D(n_e)$. Профиль остается монотонным, и локальная кривизна связана с D выражением:

$$n_e''(r) \simeq \frac{dD(n_e(r))}{dn_e}. \quad (4.8.25)$$

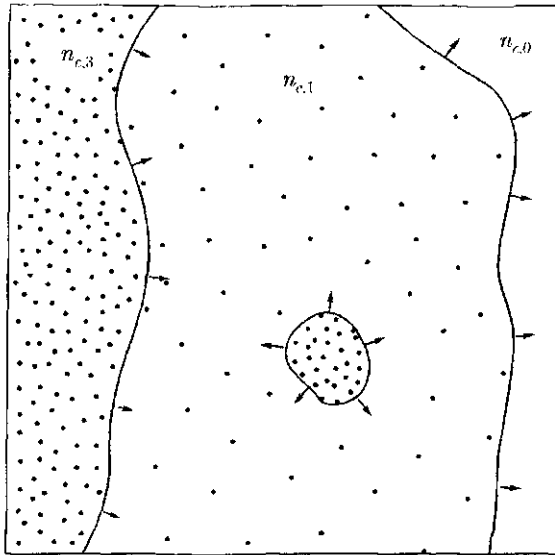


Рис. 4.8.6. В случае четырех стационарных состояний (двух устойчивых состояний) возможно распространение двух разных фронтов. Фронт второго типа может возникнуть из-за нуклеации

Возможно образование фронтов диффузии. Применяя автомодельный подход к решению нелинейного уравнения диффузии, можно рассчитать так называемые температурные волны (VASILEV et al., 1987) даже при отсутствии реакций.

Теперь посмотрим, как зависимость параметра D от плотности может повлиять на распространение фронта в реакционно-диффузионной системе с двумя устойчивыми состояниями. Если использовать аппроксимацию Якоби-Паде для кулоновского сдвига, мы увидим, что коэффициент диффузии будет иметь минимум, поскольку

$$D \simeq \frac{\partial(\mu_e + \mu_i)}{\partial n_e}. \quad (4.8.26)$$

Это ведет к более крутым профилям фронтов. Более того, может возникнуть область отрицательных значений D на плоскости плотность-температура и

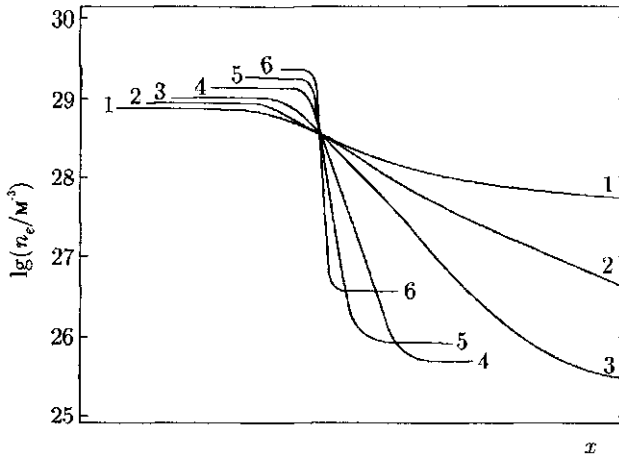


Рис. 4.8.7. Профили фронта для одного значения температуры ($T = 10000$ К) и разных значений плотности числа тяжелых частиц n : 1 — 1,946; 2 — 2,0; 3 — 2,1; 4 — 2,5; 5 — 3,0; 6 — 3,8 ($\times 10^{23}$ см $^{-3}$). Значения соответствующих скоростей фронта v находятся в пределе от 271 м/с (случай 1) до $1,98 \cdot 10^5$ м/с (случай 6)

начнется отрицательная диффузия:

$$\frac{\partial}{\partial n_e}(\mu_e + \mu_1) < 0. \quad (4.8.27)$$

Такая ситуация ведет к фазовому расслоению (спинодальный распад) и образованию устойчивых капель (BONITZ et al., 1989). Такие капли хорошо известны и наблюдались в экспериментах с электрон-дырочной плазмой в полупроводниках (JEFFRIES and KELDYSH, 1983). Мы считаем, что рассматриваемая нами модель может также помочь изучить кинетику капель на основе микроскопической модели.

Более подробный анализ характеристик нелинейной диффузии в водородоподобной плазме был ранее проведен Боницем (BONITZ, 1990).

4.9. Термодинамика необратимых процессов ионизации

Кинетический подход, описанный в разделах 3.6, 4.7 и 4.8, предполагает решение довольно сложных систем нелинейных дифференциальных уравнений или уравнений в частных производных. Существует альтерна-

тивный феноменологический подход, основанный на методах термодинамики необратимых процессов.

В рамках данного подхода заключена идея, согласно которой термодинамические силы (например, градиенты термодинамических функций) ведут к возникновению термодинамических потоков. Их можно описать линейными соотношениями, построенными с использованием ряда феноменологических коэффициентов (DE GROOT and MAZUR, 1962; EBELING and FEISTEL, 1982, 1986; KELLER, 1977; MUSCHIK, 1990).

Метод, построенный на принципах термодинамики необратимых процессов, является в меньшей степени завершенным, нежели кинетическое описание, однако иногда применять его полезнее и удобнее, по крайней мере для качественных исследований. Чтобы продемонстрировать применение данного подхода, рассмотрим однородную изотермическую плазму, состоящую из одного вида ядер с плотностью n . Предполагается, что плазма находится в неравновесном состоянии, т. е. свободная энергия, приходящаяся на ядро,

$$\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1, \dots) \quad (4.9.1)$$

не минимальна. Здесь $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2 \dots$ — относительные доли различных ионов, $\alpha_i = n_i/n$, характеризующих полностью ионизованное состояние. В условиях теплового резервуара (когда заданы значения температуры и общего количества частиц) необходимо определить такое состояние плазмы, для которого свободная энергия минимальна:

$$\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1, \dots) \rightarrow \text{Min}. \quad (4.9.2)$$

В условиях равновесия вероятность установления конкретного ионного состава подчиняется каноническому распределению

$$P(\alpha_0, \alpha_1, \dots) = \text{const} \exp \left(- \frac{N\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1, \dots)}{k_B T} \right). \quad (4.9.3)$$

Теперь проанализируем структуру ϕ как функцию $\{\alpha_i\}$. В области достаточно низких плотностей свободная энергия имеет точно один минимум, а функция распределения вероятностей имеет один максимум, соответствующий решению уравнения Саха. В общем случае данное решение соответствует умеренной степени ионизации (за исключением случаев очень низких плотностей). При более высоких плотностях свободная энергия может иметь второй минимум, который соответствует высокой степени ионизации. С увеличением плотности этот новый минимум становится все глубже и глубже, в то время как первый минимум исчезает (EBELING, 1990a). Мы

уже говорили о том, что существование двух минимумов у свободной энергии может говорить о плазменном фазовом переходе. Чтобы определить границу сосуществующих фаз, необходимо провести касательную или воспользоваться методом суммарного химического потенциала (FÖRSTER et al., 1991a), который мы описывали в разделе 4.1.

Теперь рассмотрим кинетику процессов ионизации. Известно, что значения констант скорости, фигурирующих в кинетических уравнениях, зависят от эффектов неидеальности (см. раздел 3.6). Простую качественную картину кинетики ионизации можно получить из предположения о простой динамики градиентов:

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = -D_i \frac{\partial}{\partial \alpha_i} (N\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1, \dots)) \quad (4.9.4)$$

при $i = 0, 1, \dots$. Здесь D_i выступает в роли своего рода «коэффициента

диффузии» при движении в направлении i в пространстве относительных долей $\{\alpha_i\}$. Видим, что в рамках данного приближения кинетика ионизации описывается градиентами свободной энергии. При этом можно учесть флуктуационные эффекты используя уравнение Эйнштейна-Фоккера-Планка для плотности распределения вероятности (MOSS and MC CLINTOCK, 1988):

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha_1, \alpha_2, \dots, t) = \sum_i D_i \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \left(k_B T \frac{\partial P}{\partial \alpha_i} - P N \frac{\partial \phi}{\partial \alpha_i} \right). \quad (4.9.5)$$

Видим, что стационарное решение уравнения (4.9.5) соответствует равновесному каноническому распределению (4.9.3). Однако подчеркнем, что в рамках подхода, основанного на принципах термодинамики необратимых процессов, можно получить лишь качественное описание системы, поэтому его необходимо дополнить кинетическими исследованиями, описанными в разделе 3.6 (см. также подробное изложение этой проблемы в монографии Бибермана и др. (БИБЕРМАН и др., 1982)).

Рассмотрим конкретный пример — гелиевую плазму (EBELING, 1990a). Свободная энергия при постоянной температуре T и полном количестве ядер N зависит в химической модели от двух переменных, в качестве которых возьмем α_0 и α_1 — относительные доли ядер в атомах и однократных ионах, соответственно. Тогда свободная энергия, приходящаяся на ядро, будет иметь вид:

$$\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1) = \frac{F}{N} = \frac{f}{n}. \quad (4.9.6)$$

Из условия сохранения общей плотности ядер и общей плотности электронов имеем:

$$\begin{aligned}\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 &= 1, \\ 2\alpha_0 + \alpha_1 + 2\alpha &= 2.\end{aligned}\quad (4.9.7)$$

Здесь α — доля свободных электронов, $\alpha = n_e/n_{e,\text{общ}}$; α_2 — относительная доля голых ядер. Представим эти два параметра в виде:

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= 1 - \alpha_0 - \alpha_1, \\ \alpha &= 1 - \alpha_0 - \frac{\alpha_1}{2}.\end{aligned}\quad (4.9.8)$$

В условиях теплового резервуара (когда известны значения температуры и полного числа частиц) необходимо найти такое состояние плазмы, которое характеризуется наименьшим значением свободной энергии относительно переменных α_0 и α_1 :

$$\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1) \rightarrow \text{Min}.\quad (4.9.9)$$

Соответствующее каноническое распределение будет иметь вид:

$$P(\alpha_0, \alpha_1) = \text{const} \exp\left(-\frac{N\phi(T, n, \alpha_0, \alpha_1)}{k_B T}\right).\quad (4.9.10)$$

При низких плотностях ($n \ll 10^{23} \text{ см}^{-3}$) свободная энергия имеет строго один минимум, а распределение вероятностей — один максимум, соответствующий решению уравнения Саха. В общем случае данное решение соответствует умеренной степени ионизации (за исключением случаев очень низких плотностей). При более высоких плотностях может появиться второй минимум свободной энергии, соответствующий высокой степени ионизации. С повышением плотности этот новый минимум становится все глубже и глубже, в то время как первый минимум исчезает. Данная ситуация проиллюстрирована на рис. 4.9.1-3 для случая гелиевой плазмы при температуре $T = 30000 \text{ К}$. Пунктирной линией на рисунке показаны уровни, характеризующиеся постоянным значением свободной энергии, приходящейся на ядро. Стрелками показаны линии наискорейшего спуска. Штрихпунктиром обозначена граница раздела между двумя зонами притяжения. Жирные точки — это состояния притяжения, соответствующие минимумам функции. Когда плотность равна $n = 10^{23} \text{ см}^{-3}$, выделяют две области притяжения (см. рис. 4.9.1). Первый минимум равен $-7,35 \text{ Ry}$ (ридберга), второй минимум $-7,21 \text{ Ry}$. Барьер на границе между двумя областями притяжения

не превышает значения $0,03 R_y$. Следовательно, между двумя минимумами возможна сильная флуктуация и многократные переходы. При более высоких плотностях левая точка минимума, соответствующая более высокой степени ионизации, становится все устойчивее и смещается в сторону более высоких степеней (рис. 4.9.2-3).

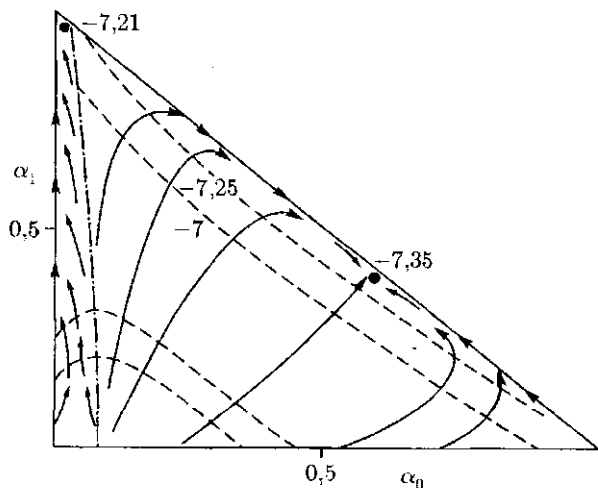
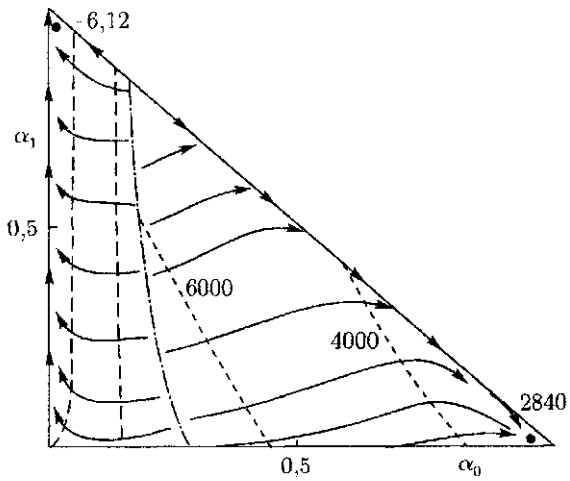
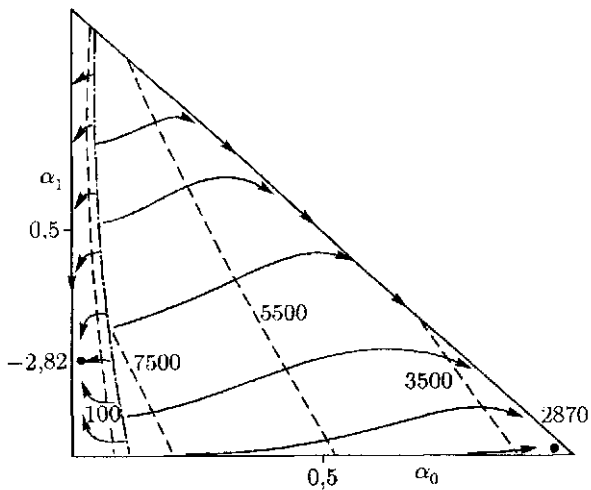


Рис. 4.9.1. Диаграмма свободной энергии при $n = 10^{23} \text{ см}^{-3}$

Существование двух минимумов свободной энергии говорит о фазовом переходе. В рамках данного подхода кинетика ионизации приводит к градиентной динамике ($i = 0, 1$) согласно уравнению (4.9.9). Процесс ионизации будет соответствовать градиентным линиям, обозначенным стрелками на рис. 4.9.1-3. Чтобы учесть флуктуационные эффекты, можно воспользоваться уравнением Эйнштейна-Фоккера-Планка (4.9.5). Применительно к свободной энергии мы воспользовались тем же самым подходом, который был описан в первой части раздела 4.3.

Теперь кратко охарактеризуем преимущества и недостатки данного подхода. Несомненно, к преимуществам можно причислить его относительную простоту. Даже для описания довольно сложных систем, таких как гелиевая плазма с однократной и двукратной ионизацией, не представляет сложности решение задач минимизации. Аппроксимация Якоби-Паде демонстрирует приемлемое поведение в случае полной ионизации, т. е. для

Рис. 4.9.2. Диаграмма свободной энергии при $n = 10^{24} \text{ см}^{-3}$ Рис. 4.9.3. Диаграмма свободной энергии при $n = 10^{24.5} \text{ см}^{-3}$

левой части рисунков 4.9.1-3. При низких степенях ионизации (правые части рисунков 4.9.1-3) приближение ван дер Ваальса для твердых сфер является довольно грубым. Следовательно, в плотной атомарной области результаты имеют не более чем качественный характер. Понятно, что необходимо дальнейшее усовершенствование метода, например, за счет расчетов зонной структуры. Однако при этом можно легко лишиться прозрачности и аналитичности, которые свойственны данному подходу. Чтобы провести более точные вычисления, необходимо приложить больше вычислительных усилий. Для получения быстрой полуколичественной оценки удобнее применять аппроксимации Якоби–Паде. Еще раз подчеркнем, что метод скорейшего спуска, основанный на термодинамике необратимых процессов, дает лишь грубое приближение для пути ионизации. В полноценных кинетических моделях должен учитываться тот факт, что в разных направлениях пространства ионизация осуществляется с разной скоростью.

ГЛАВА 5

Уравнение состояния и состав МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

5.1. Методы расчета состава и термодинамических свойств многокомпонентных систем

Развитие методов расчета термодинамических свойств газов и плазмы в значительной мере стимулировалось появлением таких важных прикладных физических задач как, исследование физических процессов в камерах сгорания ракетных двигателей, изучение явлений, возникающих при входе космических аппаратов в атмосферу планет, исследование звездных атмосфер и т. д. В результате эти методы хорошо разработаны для расчета самых различных объектов от простых газовых систем до многокомпонентных, многофазных смесей, состоящих из атомов нескольких химических элементов. Значительная часть посвященных этой теме работ связана с расчетом идеальнoгазовых многокомпонентных смесей или многофазных многокомпонентных систем, в которых в газовой фазе можно пренебречь межчастичным взаимодействием (HUFF et al., 1951; АЛЕМАСОВ, 1971). Позднее были разработаны методы расчета химического равновесия в смесях реальных газов (БАЙБУЗ и др., 1986), учитывающие специфические для плотных газов эффекты неидеальности. Все упомянутые выше работы ограничивались случаем не очень высоких температур, когда ионизацией атомов можно практически пренебречь. Напротив ионизация существенна в задачах астрофизики и, в частности, при изучении звездных атмосфер, где температуры достаточно высоки для отрыва от ядер нескольких или даже всех электронов. В этих задачах появлялась проблема, связанная с кулоновским взаимодействием заряженных частиц, которое впрочем было не очень велико при характерных для этих задач невысоких плотностях, что позволяло описать кулоновские эффекты с помощью простых асимптотических приближений (KRAEFT et al., 1986; ГРЯЗНОВ и др., 1980 b). Надо отметить, что наиболее эффективные из существующих методов расчета основаны на учете особенностей физической модели исследуемой системы.

Это особенно существенно для исследования неидеальных систем, когда оказывается, что методы расчета и соответствующие алгоритмы не являются универсальными, а практически применимы лишь для неидеальности определенного вида (см. например, БАЙБУЗ и др., 1986).

Один из возможных подходов к решению этой задачи известен, как химическая модель плазмы (EBELING, 1969; см. также главу 3). Последовательный, но более сложный подход к вычислению термодинамических функций основан на физической модели (EBELING et al., 1976a; ГРЯЗНОВ и др., 1980b; KRAEFT et al., 1986), однако для сложных систем и, в частности, для плазмы, содержащей атомы нескольких химических элементов, трудности, связанные с ее реализацией многократно возрастают, поэтому в практике расчетов обычно применяется более простая химическая модель. Как хорошо известно, эта модель заранее предполагает наличие частиц определенных сортов, имеющих непрерывный спектр энергий, а влияние внутренней структуры частиц (связанных состояний) учитывается введением индивидуальных статсумм. Это является источником известных трудностей, связанных с условностью разделения всех степеней свободы на поступательные и внутренние, что обходится в каждой конкретной модели из тех или иных физических соображений (EBELING et al., 1976a; ГРЯЗНОВ и др., 1980b). Существует множество литературных источников, посвященных описанию физических аспектов применения химической модели для расчета неидеальной плазмы. В данном разделе мы рассмотрим методы расчета термодинамических функций и соответствующие математические процедуры, необходимые для изучения неидеальной многокомпонентной плазмы.

Сделанные выше предварительные замечания относительно существующих методов расчета химического и ионизационного равновесия позволяют проанализировать проблемы, возникающие при разработке вычислительных методов термодинамики неидеальной плазмы. В значительной мере они связаны с необходимостью вычислять параметры уравнения состояния и термодинамические функции вещества в широком диапазоне температур и плотностей. Такие актуальные физические задачи, как исследование процессов сжатия вещества ударными волнами, взаимодействие с веществом мощных потоков излучения, требуют адекватного описания термодинамики неидеальной плазмы, начиная от области конденсированного состояния вплоть до экстремально высоких температур и давлений, соответствующих полностью ионизованной сильносжатой плазме. При изменении температур и давлений в столь широких пределах состав плазмы существенно изменяется. Поэтому предполагаемый метод расчета должен с одной стороны предусматривать образование многоатомных молекул и

молекулярных комплексов, а с другой учитывать процессы диссоциации и ионизации любой кратности. Кроме того, при высоких плотностях в зависимости от температуры могут проявляться самые разнообразные механизмы взаимодействия между частицами, определяющие термодинамические свойства системы, включая кулоновское взаимодействие между заряженными частицами, взаимодействие нейтральных частиц между собой и заряженных частиц с нейтральными, а при экстремально высоких температурах и плотностях — короткодействующее отталкивание ионов вследствие перекрывания электронных оболочек. При этом сильное межчастичное взаимодействие сказывается, как было сказано выше (раздел 3) и на структуре связанных состояний, что выражается в зависимости статистических сумм частиц от плотности, а не только температуры. Это ограничивает применимость обычных методов термодинамического расчета многокомпонентных систем (HUFF et al., 1951; АЛЕМАСОВ, 1971), основанных на использовании термодинамических функций индивидуальных веществ (ГУРВИЧ и др., 1978), областью низких плотностей, где этим эффектом можно пренебречь. Необходимо также учитывать, что адекватное описание вещества при изменении термодинамических параметров в широких пределах может осуществляться разными моделями, начиная от приближения идеального газа и до модели вырожденного электронного газа с сильным кулоновским взаимодействием ионов. В силу того, что область применимости каждой из моделей ограничена, метод расчета должен обладать достаточной универсальностью для того, чтобы использование различных моделей неидеальности не приводило к существенному изменению математической процедуры.

Итак, сформулируем кратко требования к методу расчета термодинамических свойств неидеальной многокомпонентной плазмы:

1. Возможность включать в расчет частицы любых сортов от сложных многоатомных комплексов до ионов произвольной кратности.
2. Универсальность по отношению к моделям плазменной неидеальности, учитывающим как взаимодействие свободных частиц, так и влияние этого взаимодействия на структуру энергетического спектра связанных состояний.

Как известно в состоянии термодинамического равновесия свободная энергия системы достигает минимума (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1976). Отсюда можно получить уравнения, называемые обычно уравнениями равновесия, связывающие между собой числа частиц различных сортов. Для этого рассмотрим систему частиц L сортов при температуре T , заключенную в объем V и содержащую $K - 1$ химических элементов и электроны. При

этом электроны можно рассматривать как отдельный химический элемент. Согласно химической модели вещества ядра и электроны могут образовывать составные частицы различных сортов — атомы, ионы, молекулы и т. д., так что каждый сорт характеризуется соответствующим числом частиц N_j . Тогда свободная энергия системы может быть записана в виде:

$$F(\{N_i\}, V, T) = \sum_{j=1}^L N_j k_B T \left(\ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} - 1 \right) + \Delta F_{\text{int}}(\{N_i\}, V, T) \quad (5.1.1)$$

где $n_j = N_j/V$ — плотность (концентрация) числа частиц сорта j , Λ_j — тепловая длина волны де Бройля, σ_j — внутренняя статистическая сумма, в которой нуль энергии соответствует состоянию полного распада частицы на ядра и электроны; ΔF_{int} — поправка к идеальной больцмановской части свободной энергии, вызванная взаимодействием частиц между собой и вырождением. Так как система не обменивается частицами с окружающей средой, число ядер каждого из K химических элементов, включая электроны, остаются неизменными, следовательно

$$\sum_{j=1}^L \nu_k^j N_j = \tilde{N}_k; \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (5.1.2)$$

где \tilde{N}_k — полное число ядер сорта k в системе, ν_k^j — число ядер сорта k в частице i -го сорта.

Условие экстремума свободной энергии системы, заключенной в объеме V при температуре T , при постоянных \tilde{N}_k выражается следующим образом

$$\sum_{j=1}^L \left(\frac{\partial F}{\partial N_j} \right)_{V, T, \{N_i\}} \delta N_j = 0. \quad (5.1.3)$$

Из (5.1.2) ясно, что дифференциалы N_j связаны соотношениями

$$\sum_{i=1}^L \nu_k^i \delta N_i = 0, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (5.1.4)$$

Если условиться номерами сортов смеси с 1 до K обозначать свободные электроны и голые ядра, тогда из (5.1.4) очевидно следует

$$\delta N_k = - \sum_{i=K+1}^L \nu_k^i \delta N_i, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (5.1.5)$$

Подставляя (5.1.5) в (5.1.3) и имея в виду, что химический потенциал определяется выражением

$$\mu_i = \left(\frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{V, T, \{N_j\}} \quad (5.1.6)$$

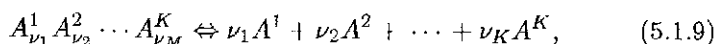
получим соотношение

$$\sum_{i=K+1}^L \left(\mu_i - \sum_{k=1}^K \nu_k^i \mu_k \right) \delta N_i = 0, \quad (5.1.7)$$

где дифференциалы δN_i являются независимыми. Следовательно, из (5.1.7) будем иметь $L - K$ соотношений

$$\mu_j = \sum_{k=1}^K \nu_k^j \mu_k, \quad j = K + 1, \dots, L. \quad (5.1.8)$$

Очевидно каждое из соотношений (5.1.8) соответствует химической реакции вида



которая представляет собой распад комплексной частицы $A_{\nu_1}^1 A_{\nu_2}^2, \dots, A_{\nu_M}^K$ на ядра и электроны. Из формулы (5.1.1) для свободной энергии следует, что химический потенциал имеет следующий вид

$$\mu_j = \ln \left(\frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \Delta \mu_j^{int}(\{n_i\}, T), \quad j = 1, 2, \dots, L. \quad (5.1.10)$$

Тогда уравнения (5.1.8) принимают вид обычных уравнений химического и ионизационного равновесия

$$\ln n_j - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \ln n_k = \ln K_n^j(\{n_i\}, T), \quad (5.1.11)$$

аналогом которых для идеального газа является закон действующих масс, а для идеальной плазмы — уравнения Саха (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1976)

Правая часть в (5.1.11) представляет собой константу равновесия химической реакции (5.1.9), которая может быть записана в форме

$$\ln K_n^j(\{n_j\}, T) = \ln \frac{\tilde{\sigma}_j}{\Lambda_j^3} + I_j - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[\ln \frac{\tilde{\sigma}_k}{\Lambda_k^3} + I_k \right] - \left(\Delta\mu_j^{int}(\{n_i\}, T) - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \Delta\mu_k^{int}(\{n_i\}, T) \right), \quad (5.1.12)$$

где $\Delta\mu_j^{int}(\{n_i\}, T)$ — поправка к идеальной части химического потенциала, ответственная за взаимодействие частиц между собой, I_j — энергия, необходимая для распада j -й частицы на ядра и электроны, а выражение в круглых скобках представляет собой изменение энергии связи электронов и ядер в комплексной (составной) частице за счет межчастичного взаимодействия, которое в случае ионизации соответствует «снижению потенциала ионизации» в плазме. Здесь статистическая сумма

$$\tilde{\sigma}(\{n_j\}, T) = \sum_i \omega_i(\{n_j\}, T) g_i e^{-E_i/k_B T} \quad (5.1.13)$$

вычисляется по всем уровням энергии внутренних степеней свободы частицы, отсчитанным от энергии ее основного состояния, множитель ω_i вообще говоря зависит как от температуры, так и от плотности и определяется принятой в расчете моделью неидеальности. Обычно в термодинамических расчетах началом отсчета энергии служит состояние системы, в котором все вещество находится в виде атомов на низшем энергетическом уровне. Поэтому вместо I_j удобно ввести величины A_j , равные разности между энергией частицы и энергией атомов, составляющих частицу, разведенных на бесконечное расстояние. Например, для однократно заряженного иона величина A_j равна потенциалу ионизации, а для молекулы — энергии диссоциации с противоположным знаком и т. д. В дальнейшем мы для простоты будем опускать волну над знаком статсуммы, имея в то же время ввиду, что энергии частиц отсчитываются от их основных состояний. Тогда уравнения химического и ионизационного равновесия (5.1.11) можно записать в виде

$$\ln \left(\frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \frac{A_j}{k_B T} + \frac{\Delta\mu_j^{int}}{k_B T} = \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[\ln \left(\frac{n_k \Lambda_k^3}{\sigma_k} \right) + \frac{A_k}{k_B T} + \frac{\Delta\mu_k^{int}}{k_B T} \right]; \quad j = K + 1, \dots, L \quad (5.1.14)$$

Если система находится при фиксированном давлении P_0 и температуре T , то уравнения (5.1.14) должны быть дополнены уравнением состояния

$$\sum_{j=1}^L n_j k_B T + \Delta P^{int}(\{n_i\}, T) = P_0, \quad (5.1.15)$$

где ΔP — поправка к идеальной части давления, соответствующая поправке на неидеальность ΔF в свободной энергии. При рассмотрении системы с заданными плотностью ρ_0 и температурой вместо уравнения состояния необходимо привлечь уравнение для плотности

$$\sum_{j=1}^L m_j n_j = \rho_0, \quad (5.1.16)$$

где m_j — масса j -й частицы.

В практических расчетах вместо соотношений (5.1.2) задаются отношением числа ядер данного химического элемента к полному числу ядер химических элементов, входящих в смесь

$$b_k = \frac{\tilde{N}_k}{\sum_{i=2}^K \tilde{N}_i}.$$

Если индексом 1 обозначить электроны, тогда эти отношения можно выразить в виде

$$\beta_k(\{n_j\}) \equiv \frac{\sum_{j=1}^L \nu_k^j n_j}{\sum_{i=2}^K \sum_{j=1}^L \nu_i^j n_j}; \quad k = 2, \dots, K \quad (5.1.17)$$

и соответственно уравнения пропорций

$$\beta_k(\{n_j\}) = b_k; \quad k = 2, \dots, K. \quad (5.1.18)$$

Плазма в равновесии должна удовлетворять условию электронейтральности

$$\sum_{j=1}^L z_j^{(+)} n_j = \sum_{j=1}^L z_j^{(-)} n_j, \quad (5.1.19)$$

где $z_j^{(+)}$ и $z_j^{(-)}$ – заряды положительно и отрицательно заряженных ионов. С учетом данного условия можно обобщить уравнения (5.1.18), включив в материальный баланс и электроны в качестве самостоятельного «химического элемента».

Вместо величин β_k в расчетах часто используются эквивалентные им величины α_k

$$\alpha_k(\{n_j\}) \equiv \frac{\sum_{j=1}^L \nu_k^j n_j}{\left[\sum_{l=1}^K \left(\sum_{j=1}^L \nu_l^j n_j \right)^2 \right]^{1/2}}; \quad k = 1, \dots, K. \quad (5.1.20)$$

Этим величинам соответствуют уравнения

$$\alpha_k(\{n_j\}) = c_k; \quad k = 1, \dots, K, \quad (5.1.21)$$

которые мы будем использовать в дальнейшем.

Таким образом, мы получили полную систему уравнений, необходимую для определения состава термодинамически равновесной газовой системы, которая включает

1. Уравнение состояния

$$\sum_{j=1}^L n_j k_B T + \Delta P^{int}(\{n_i\}, T) = P_0$$

для системы с заданными P_0 и T или уравнение для плотности

$$\sum_{j=1}^L m_j n_j = \rho_0$$

для фиксированных ρ_0 и T .

2. Уравнения химического и ионизационного равновесия

$$\ln \left(\frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \frac{A_j}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_j^{int}}{k_B T} - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[\ln \left(\frac{n_k \Lambda_k^3}{\sigma_k} \right) + \frac{A_k}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_k^{int}}{k_B T} \right];$$

$$j = K + 1, \dots, L.$$

3. Уравнения пропорций химических элементов

$$\alpha_k(\{n_j\}) = c_k; \quad k = 1, \dots, K.$$

Система (5.1.14)–(5.1.16), (5.1.21) представляет собой систему трансцендентных уравнений относительно n_j при заданных $\{c_k\}$ и заданных P_0 и T (или ρ_0 и T).

В настоящее время существует два подхода к расчету состава многокомпонентных равновесных систем, которые лежат в основе множества конкретных реализаций. Первый из них основан на решении системы уравнений равновесия (5.1.14)–(5.1.16), (5.1.21), второй на прямой минимизации соответствующего термодинамического потенциала. Не претендуя на общность, мы обсудим возможности каждого из этих методов для неидеальной плазмы и конкретные алгоритмы расчета.

Рассматривая применение подхода, основанного на решении уравнений равновесия, отметим особенности неидеальной плазмы, как объекта термодинамического расчета. Прежде всего заметим, что этот метод близок к методам (BRINKLEY, 1947) основанным на использовании закона действующих масс для идеальногогазовых систем. Отличие в нашем случае заключается в появлении поправки на неидеальность в уравнении состояния и, что более существенно в зависимости констант равновесия от плотности. Последнее обстоятельство, как уже упоминалось, делает невозможным использование заранее загабулированных констант равновесия (например, из (ГУРВИЧ и др., 1978)), поэтому возникает необходимость их вычисления в процессе решения системы уравнений равновесия. Для расчета констант в свою очередь необходимо вычислять статсуммы (5.1.16) либо по уровням энергии изолированных частиц со статистическими весами, зависящими от выбранной модели взаимодействия, либо по совокупности уровней, рассчитанных с учетом взаимодействия частиц в среде.

При расчете термодинамических свойств сильносжатой неидеальной плазмы к методу расчета предъявляются следующие очевидные требования. С одной стороны, метод должен позволять формально получать решение при любых плотностях, а с другой — быть достаточно гибким, чтобы была возможность использования различных моделей неидеальности.

Эти требования в значительной мере ограничивают выбор алгоритма решения, учитывая также, что мы заранее не можем предположить примерный порядок значений плотностей числа частиц даже для умеренной неидеальности (когда $|\Delta P/nk_B T| \sim 1$). Заранее ограничивая себя случаем умеренно неидеальной плазмы, можно предложить следующую схему решения. На начальном этапе фиксируем поправки на неидеальность и статсуммы, затем, решая уравнения равновесия, находим состав и вычисляем новые значения поправок и статсумм. Повторяем этот процесс до тех пор, пока составы на двух соседних итерациях не будут достаточно близки. Очевидно, эта процедура решения универсальна по отношению к моделям

неидеальности. Пользуясь тем, что при фиксированных статсуммах и поправках плазма является «квазиидеальной», можно, используя уравнения химического и ионизационного равновесия, значительно сократить число переменных. Для этого плотности числа частиц всех компонент выразим через плотности числа ядер и электронов. Эти K компонент назовем базисными. Тогда, если обозначить

$$x_k = \ln n_k; \quad k = 1, \dots, K \quad (5.1.22)$$

можно $(L + K + 1)$ уравнения (5.1.14)–(5.1.16), (5.1.21) свести к $(K + 1)$ уравнениям

$$P(\{x_j\}, T) \equiv k_B T \sum_{j=1}^L \exp\left(K_j + \sum_{k=1}^K \nu_k^j x_k\right) + \Delta P^{int}(\{x_i\}, T) = P_0$$

$$\alpha_k(\{x_j\}) \equiv \frac{\sum_{j=1}^L \nu_k^j \exp\left(K_j + \sum_{k=1}^K \nu_k^j x_k\right)}{\left[\sum_{m=1}^K \left(\sum_{j=1}^L \nu_m^j \exp\left(K_j + \sum_{k=1}^K \nu_k^j x_k\right)\right)^2\right]^{1/2}}; \quad k = 1, \dots, K \quad (5.1.23)$$

от K переменным x_k (α_k связаны соотношением $\sum_{k=1}^K \alpha_k = 1$).

Решение системы уравнений (5.1.23) имеет наглядную геометрическую интерпретацию. При фиксированных поправках на неидеальность и статсуммах из уравнений (5.1.23) видно, что

$$\alpha_k(x) = \frac{\frac{\partial P}{\partial x_k}}{|\nabla P|}, \quad (5.1.24)$$

где $\mathbf{x} = \{x_k\}_1^K$. Отсюда следует, что для решения уравнений (5.1.23) необходимо на гиперповерхности $P(\mathbf{x}) = P_0$ найти точку, в которой нормаль совпадает с заданной. Можно показать, что такая точка единственна. Для этого очевидно достаточно доказать, что гиперповерхность постоянного давления является выпуклой.

Пусть \mathbf{x} — вектор малой длины, лежащий в плоскости, касательной к гиперповерхности $P(\mathbf{x}) = P_0$ в точке \mathbf{x} и пусть $\delta\alpha = \alpha(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) - \alpha(\mathbf{x})$.

Тогда выпуклость гиперповерхности означает, что скалярное произведение $(\delta\alpha, \delta x)$ должно быть положительным при любых достаточно малых $|\delta x|$ (РАШЕВСКИЙ, 1956).

Обозначая одинаковыми те индексы, по которым проводится суммирование, получим

$$\begin{aligned} (\delta\alpha, \delta x) &= \delta x_i \left[\frac{\frac{\partial^2 P}{\partial x_k \partial x_i}}{|\nabla P|} - \alpha_i \alpha_l \frac{\frac{\partial^2 P}{\partial x_l \partial x_k}}{|\nabla P|} \right] \delta x_k = \\ &= \frac{1}{|\nabla P|} \sum_{j=1}^L \left[\nu_i^j \delta x_i \nu_k^j \delta x_k - \alpha_i \delta x_i \alpha_l \nu_l^j \nu_k^j \delta x_k \right] \exp [K_n^j + (\nu^j, x)]. \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

Учитывая, что $(\delta\alpha, x) = 0$, получим

$$(\delta\alpha, \delta x) = \frac{1}{|\nabla P|} \sum_{j=1}^L (\nu^j, \delta x)^2 \exp [K_n^j + (\nu^j, x)] > 0 \quad (5.1.26)$$

так, как среди векторов ν^j обязательно имеется K линейно независимых. Заметим, что доказанное утверждение соответствует известному результату, полученному Зельдовичем (ЗЕЛЬДОВИЧ, 1938).

Для решения системы уравнений (5.1.23) сконструируем функционал, точка минимума которого совпадает с решением нашей системы. В частности функционал может быть выбран в форме

$$S(x) = [f(P) - F(P_0)]^2 + \sum_{k=1}^K [g(\alpha_k) - g(c_k)]^2, \quad (5.1.27)$$

где f и g — некоторые функции. Очевидно, что точка, где $S(x)$ достигает нуля, является решением системы (5.1.23). Так как $S(x)$ не имеет непосредственного термодинамического смысла, желательно, чтобы этот минимум был единственным, иначе это значительно усложнит процедуру. Воспользовавшись только что доказанным утверждением о выпуклости гиперповерхности $P(x)$ можно показать, что если функции f и g монотонны, то нулевой минимум $S(x)$ — единственный. Свобода выбора функций f и g позволяет из множества функционалов вида (5.1.27) выбирать такие, которые обладают приемлемыми геометрическими характеристиками для минимизации.

Как известно численная процедура поиска минимума функционала сводится к построению итерационного процесса для вычисления последовательности точек \mathbf{x} сходящейся к точке \mathbf{x}^* минимума функционала. Практически процесс прекращается, если точка, $\mathbf{x}^{(n)}$ полученная на n -м шаге, достаточно близка к \mathbf{x}^* , то есть если $|\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^*| < \varepsilon$, где ε — заранее заданная точность. Выбор оптимального для нашей задачи метода минимизации в значительной мере определяется геометрическими свойствами функционала $S(\mathbf{x})$. Анализ показывает, что структура поверхностей уровня $S(\mathbf{x})$ может представлять собой узкий изогнутый «овраг», форма которого может меняться в зависимости от термодинамических параметров. Отношение длины оврага к его ширине может достигать нескольких порядков. Это математически выражается в том, что производные $\frac{\partial S}{\partial l}$ сильно зависят от выбора направления l . Обычно при построении алгоритмов минимизации используют аппроксимацию следующего вида

$$S(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{p}l) \approx S(\mathbf{x}^{(k)}) + \sum_l^L \frac{\partial S}{\partial x_l} \mathbf{p}_l + t^2 \sum_l^L \sum_m^L \mathbf{p}_l \frac{\partial^2 S}{\partial x_l \partial x_m} \mathbf{p}_m, \quad (5.1.28)$$

где \mathbf{p} — единичный вектор, t — параметр. В нашем случае из-за сильной нелинейности функционала это представление аппроксимирует $S(\mathbf{x})$ лишь при очень малых t , то есть только в малой окрестности точки $\mathbf{x}^{(k)}$, кроме того матрица $\frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_m}$ может оказаться вырожденной вдали от \mathbf{x}^* . В результате становится проблематичным применение обладающих быстрой сходимостью методов второго порядка (например метод Ньютона (GILL et al. 1985)), а методы первого порядка (градиентные методы), формально обеспечивая глобальную сходимость, требуют астрономического числа шагов, и, следовательно, очень большого времени для решения задачи.

Как можно преодолеть эти трудности? Во-первых, можно попытаться изменить форму функционала, воспользовавшись свободой выбора функций f и g . Для этого в нашем частном случае можно выбрать функционал в виде

$$S(\mathbf{x}) = \{\ln[p(\mathbf{x})] - \ln[p_0]\}^2 + \sum_{k=1}^K \{\ln[\alpha_k(\mathbf{x})] - \ln[c_k]\}^2. \quad (5.1.29)$$

Вторая возможность заключается в линейной замене базисных переменных. Например, при низких температурах и достаточно больших давлениях концентрации ядер и электронов очень малы. Если же выбрать в

качестве базисных компоненты, имеющие наибольшие концентрации, то относительно таких переменных функционал (5.1.29) будет близок к квадратичному. Естественно мы можем априори лишь оценить какие компоненты будут ведущими при данных P_0 и T . Кроме того в качестве базисных могут быть выбраны только те компоненты, у которых вектора ν^j линейно-независимы. Переход от основных базисных компонент (ядер и электронов) к новым не представляет труда, если заметить, что уравнения химического и ионизационного равновесия (5.1.14) имеют одинаковый вид при любом выборе базиса, а преобразуется только матрица стехиометрических коэффициентов $\|\nu_k^j\|$. Две указанных меры все же не избавляют нас от трудностей, связанных с невозможностью хорошей оценки начального приближения $x^{(0)}$. Поэтому требования к алгоритму включают сходимость из любого начального приближения и, причем желательно с более высокой скоростью, чем обычные методы типа градиентного спуска. Одним из компромиссных вариантов является алгоритм, предложенный в работе (BRIN and PAVLOV, 1973). Он основан на предположении, что изменение переменных должно соответствовать направлению спуска. Тогда

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla S(x). \quad (5.1.30)$$

Аппроксимируя $\nabla S(x)$ в окрестности текущей точки $x^{(k)}$ вплоть до второго порядка, и заменяя производную ее конечно-разностным выражением, получим

$$x_m^{(k+1)} = x_m^{(k)} + \pi_{mi} \left[\frac{\partial S}{\partial x_i} \right] t, \quad (5.1.31) \quad x_m^{(k+1)} = x_m^{(k)} + \pi_{mi} \left[\frac{\partial S}{\partial x_i} \right] t, \quad (5.1.31)$$

где π_{mi} — матрица, обратная к матрице $\left\| \delta_{im} + t \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_m} \right\|$. Заметим, что при малых t направление спуска совпадает с градиентным, приближаясь при увеличении t к ньютоновскому. Исходя из этого выбирается и стратегия определения величины t , предусматривающая малые значения шага на начальных итерациях с его удвоением, если направление Δx на данном шаге является направлением спуска, то есть $S(x^{(k+1)}) < S(x^{(k)})$. Этот алгоритм, как правило, позволяет минимизировать функционал (5.1.29) до величин менее 10^{-5} не более, чем за 20 шагов. Отметим, что работоспособность

алгоритма сохраняется, если матрицу $\frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_i}$ заменить ее аппроксимацией

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_i} \approx \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial x_k} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \sum_{l=1}^K \frac{1}{\alpha_l^2} \frac{\partial \alpha_l}{\partial x_k} \frac{\partial \alpha_l}{\partial x_i}, \quad (5.1.32)$$

что уменьшает количество вычислений.

Все алгоритмы минимизации нуждаются в предварительном выборе начального приближения. Оценим $x^{(0)}$, вычислив для нескольких различных наборов компонент значение приведенного потенциала Гиббса

$$\tilde{G} = \frac{G}{k_B T \sum_{k=2}^K \tilde{N}_k}.$$

В качестве начального приближения возьмем модельный компонентный состав, дающий наименьшее значение \tilde{G} . Например, для оценки степени ионизации в качестве «конкурирующих» могут быть выбраны наборы, состоящие только из атомов, затем только из однократных ионов и электронов, затем двукратных ионов и т. д., тогда

$$\tilde{G} = \sum_{k=2}^K b_k \left[\ln \frac{n b_k \Lambda_k^3}{\sigma_k (1 + \sum_{l=2}^K b_l z_l)} + \frac{A_k}{k_B T} \right] + \sum_{k=2}^K b_k z_k \ln \frac{n \Lambda_e^3 \sum_{k=l}^K z_l b_l}{2(1 + \sum_{l=2}^K b_l z_l)}, \quad (5.1.33)$$

где $n = P_0/k_B T$, z_k - заряд иона сорта k , b_k - доля химического элемента k в уравнениях (5.1.18). В уравнении (5.1.33) каждый химический элемент представлен единственным компонентом: либо атомом, либо ионом.

Аналогичная процедура может быть проведена и с учетом молекул различной сложности. Одновременно эта операция может служить и для выбора базисных компонент перед началом расчета.

После нахождения минимума функционала (5.1.29), мы получаем решение системы уравнений (5.1.23), которое используется для вычисления новых значений статсумм и поправок на неидеальность. При этом полученный компонентный состав является начальным приближением для следующей итерации, а в качестве базисных компонент выбираются электроны и $(K - 1)$ компонент имеющих наибольшие концентрации n_j , при условии линейной независимости соответствующих им векторов ν^j .

Завершая описание процедуры расчета состава, коснемся вопроса о вычислении статсумм. Не обсуждая проблемы применимости той или иной модели неидеальности, заметим, что часть моделей оперирует понятием ограничения статсумм атомов и ионов, когда суммирование в (5.1.13) ведется по энергиям возбуждения, не превышающим некоторого значения, то есть по уровням, для которых

$$E_i < E_{\max} \equiv I - \Delta(\{n_j\}, T), \quad (5.1.34)$$

где Δ — параметр обрезания, I — потенциал ионизации. В этом случае статсумма является неаналитической функцией своих переменных. Поэтому удобно ввести процедуру сглаживания путем выбора определенной формы обрезającego множителя ω_i в (5.1.13)

$$\omega_i = \frac{\exp(An^*) + \exp(A)}{\exp(An^*) + \exp(An_i)}, \quad (5.1.35)$$

где $n^* = (I/I - E_{\max})$; $n_i = (I/I - E_i)$; $A = \text{const}$. Данная форма выбрана, в частности, так, чтобы при проведении расчетов в области, где $E_{\max} < 0$, вклад основного состояния не изменился.

Методы расчета статсумм двухатомных и многоатомных молекул подробно рассмотрены в справочнике (ГУРВИЧ и др., 1978). Очевидно при больших давлениях статсуммы приведенные в (ГУРВИЧ и др., 1978) должны быть скорректированы с учетом межчастичного взаимодействия. Тем не менее, в значительной части интересующей нас области термодинамических параметров вклад многоатомных молекул не является определяющим и, поэтому можно воспользоваться данными (ГУРВИЧ и др., 1978), понимая, что при высоких давлениях и низких температурах, эти данные являются лишь оценочными.

В описанной нами процедуре расчета во внешнем итерационном цикле, где происходит вычисление новых значений статсумм и поправок на неидеальность, фактически реализуется метод последовательных приближений. Этот метод может работать плохо или совсем отказать в области сильной неидеальности. В частности это происходит при высоких давлениях и температурах, когда определяющим является сильное короткодействующее отталкивание частиц на близких расстояниях. В этом случае внешний итерационный цикл либо сходится очень медленно, либо вообще расходится, не приводя к результату. Область сходимости можно расширить, вводя демпфирующие множители перед каждой из поправок и постепенно увели-

чивая их от 0 до 1. Однако это не намного улучшает сходимость, значительно увеличивая количество вычислений. Второй путь состоит в организации промежуточного итерационного цикла для вычисления давления при постоянных статсуммах и поправках к химическому потенциалу (5.1.10). Расширяя область сходимости, этот метод также не решает проблему полностью, не позволяя получить результат во многих интересных случаях.

Большинство систем, при расчете которых возникают подобные трудности, являются относительно простыми, то есть содержат атомы всего одного химического элемента. Для частного случая таких систем рассмотрим метод, основанный на прямой минимизации термодинамических потенциалов.

Рассмотрим систему, состоящую из атомов, электронов и ионов произвольной кратности, заключенную в объем V при температуре T . Так как система содержит атомы и ионы только одного химического элемента, то условия баланса химических элементов (5.1.2) и электронейтральности (5.1.19) сводятся к следующим

$$\sum_{i=2}^L n_i - n = \frac{\rho_0}{m}, \quad (5.1.36)$$

$$n_1 = \sum_{i=3}^L z_i n_i,$$

где n — плотность числа ядер, m — масса атома, а номерами 1, 2, 3, обозначены соответственно электроны, атомы, однократные, двукратные ионы и т. д. Максимальная кратность ионов очевидно равна $(L - 2)$.

Для нахождения состава необходимо решить уравнения (5.1.7), которые в этом случае имеют более простой вид

$$\mu_j = \nu_1^j \mu_1 + \mu_L \quad j = 2, \dots, L - 1, \quad (5.1.37)$$

выразив предварительно из (5.1.36) плотности n_1 и n_L через все остальные. Задачу о вычислении состава будем решать в два этапа. На первом этапе, минимизируя свободную энергию, грубо оценим компонентный состав. Затем, используя в качестве начального приближения результаты первого этапа, на втором будем решать систему уравнений (5.1.36)–(5.1.37) для окончательного определения состава.

Введем как и раньше переменные $x_j = \ln n_j$. Начальное приближение можно оценить, рассматривая упрощенные наборы компонент и сравнивая

значения свободной энергии для каждого набора. Далее будем пытаться более аккуратно найти минимум приведенной свободной энергии

$$\tilde{F} = \frac{F}{Nk_B T} = \sum_{j=1}^L \frac{n_j}{n} \tilde{\mu}_j - \frac{P}{n}. \quad (5.1.38)$$

Естественно в соответствии с химической моделью плазмы химический потенциал и давление имеют вид (5.1.10) и (5.1.15). Как и в предыдущих случаях, численная процедура минимизации представляет собой последовательность шагов:

$$\mathbf{x}_j^{(k+1)} = \mathbf{x}_j^{(k)} + P_j^{(k)} t; \quad j = 2, 3, \dots, L-1, \quad (5.1.39)$$

в которой направление и величина шага выбирается так, чтобы соблюдалось условие спуска

$$\tilde{F}(\mathbf{x}^{(k+1)}) < \tilde{F}(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (5.1.40)$$

Заметим, что мы рассматриваем случай сильной неидеальности, когда зависимость свободной энергии от \mathbf{x} значительно отличается от идеального газа. Стандартные методы минимизации первого и второго порядка (GILL et al., 1985), как и примененный нами с успехом для более сложной системы метод (БРИН, ПАВЛОВ, 1973), не обеспечивают сходимости в этом случае. Более удачным оказывается выбор направления

$$P_j^{(k)} = - \left[\tilde{\mu}_j(\mathbf{x}^{(k)}) - \nu_j^2 \tilde{\mu}_1(\mathbf{x}^{(k)}) - \tilde{\mu}_L(\mathbf{x}^{(k)}) \right]; \quad j = 2, \dots, L-1, \quad (5.1.41)$$

где $\tilde{\mu}_j = \mu_j/k_B T$ — безразмерный химический потенциал. При этом процедура определения величины шага аналогична ранее описанной — то есть t удваивается, если соблюдается условие (5.1.40), и уменьшается вдвое в противоположном случае. Критерием окончания итерационного процесса является условие

$$\left| \tilde{F}(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \tilde{F}(\mathbf{x}^{(k)}) \right| < \varepsilon, \quad (5.1.42)$$

где ε — заданная точность. Кроме того, наряду с условием (5.1.42), необходимо контролировать насколько удовлетворяются уравнения (5.1.37). Применение описанной процедуры при начальном значении величины шага порядка единицы позволяет, как правило, достичь минимума \tilde{F} с точностью 10^{-4} не более, чем за 20 шагов. Естественно в общем случае количество итераций зависит от вида поправок на неидеальность, от температуры и плотности.

Очевидно, данная процедура не позволяет с какой-либо приемлемой точностью определить плотности, тех компонент, которые дают малый вклад в свободную энергию. Например, если в слабоионизованном газе, степень ионизации не превышает 10^{-4} , то описанный метод не позволяет правильно определить даже первую значащую цифру величины электронной плотности, необходимой, например, для оценки электропроводности. Дальнейшее уточнение состава, однако, легко осуществляется применением стандартного метода Ньютона (GILL et al., 1985) для решения системы нелинейных уравнений (5.1.36)–(5.1.37), что составляет второй этап вычислений. Действительно, обычно требуется не более двух ньютоновских итераций для окончательного определения состава с высокой точностью, заведомо превышающей точность применяемых моделей плазмы. Это легко объясняется тем, что все поправки в уравнениях (5.1.37) либо слабо зависят от малых плотностей, либо сами величины поправок малы, в результате эти уравнения почти линейны относительно «малых компонент».

Аналогичная процедура может быть построена в случае, когда заданы давление и температура. В этом случае на первом этапе минимизируется приведенный термодинамический потенциал Гиббса

$$\tilde{G} = \frac{G}{Nk_B T} = \sum_{j=1}^L \frac{n_j}{n} \tilde{\mu}_j \quad (5.1.43)$$

при условии

$$\begin{aligned} P(\{n_j\}, T) &= P_0; \\ n_1 &= \sum_{i=3}^L z_i n_i. \end{aligned} \quad (5.1.44)$$

Заметим что, для неидеальной плазмы первое из условий (5.1.44) невозможно удовлетворить автоматически. Фактически поиск минимума \tilde{G} должен осуществляться на гиперповерхности $P = \text{const}$, имеющей в случае сильной неидеальности весьма сложный вид. Поэтому полностью сохраняя стратегию выбора направления и величины шагов как и в предыдущем случае, необходимо после каждого сделанного шага (5.1.39) найти такую величину n , чтобы соблюдалось условие $P = \text{const}$. Это требует дополнительного итерационного цикла, который, впрочем, сводится к стандартному численному методу решения первого из уравнений (5.1.44) относительно неизвестного n . Как и в случае постоянных ρ и T , на втором этапе можно уточнить состав, решая уравнения (5.1.37) совместно с (5.1.44).

После того, как состав определен, дальнейшее вычисление остальных термодинамических характеристик не представляет труда. Часть суммарных термодинамических величин определяется простым суммированием вкладов от каждой компоненты. Например, массовая плотность

$$\rho = \sum_{j=1}^L m_j n_j, \quad (5.1.45)$$

удельная внутренняя энергия (на единицу массы)

$$E(\{n_j\}, T) = \frac{1}{\rho} \left\{ \sum_{j=1}^L n_j \left(\frac{3}{2} k_B T + \bar{E}_j^{ex} + A_j \right) + \Delta E(\{n_j\}, T) \right\}, \quad (5.1.46)$$

энтальпия

$$H(\{n_j\}, T) = E + \frac{P}{\rho}, \quad (5.1.47)$$

энтропия

$$S = \frac{1}{T} \left\{ H - \sum_{j=1}^L \frac{n_j}{\rho} \mu_j \right\}, \quad (5.1.48)$$

и другие термодинамические функции. Для этого необходимо вычислить средние энергии возбуждения

$$\bar{E}_j^{ex} = T^2 \frac{\partial \ln \sigma_j}{\partial T}, \quad (5.1.49)$$

и поправку на неидеальность к внутренней энергии ΔE . Заметим, что в (5.1.46) нуль энергии соответствует идеальному газу атомов при $T = 0$ К.

Наряду с термодинамическими функциями могут быть вычислены и такие величины, как теплоемкости C_V и C_P , скорость звука и т. д., для чего необходимо провести дополнительные вычисления равновесного состава и термодинамических функций в точках близких по температуре и плотности к заданным.

Изложенные методы лежат в основе программных модулей SAHA-4 для расчета термодинамики многокомпонентной неидеальной плазмы, содержащей до 10 различных химических элементов и SAHA-3 для расчета сильнонеидеальной одноэлементной плазмы. Наряду с расчетом равновесного состава и термодинамических функций для заданных P и T , ρ и T

комплекс программ для термодинамических расчетов SAHA позволяет рассчитывать изобары, изохоры, изоэнтальпы, изоэнтропы, ударные адиабаты и другие термодинамические кривые, используя различные модели межчастичного взаимодействия.

5.2. Модель ограниченного атома

При проведении термодинамических расчетов разреженных высокотемпературных газов и плазмы атомы обычно считаются идеальной подсистемой, не взаимодействующей с окружающей средой. Соответственно предполагается, что энергетический спектр связанных состояний идентичен спектру изолированных частиц, а влияние неидеальности на связанные состояния в рамках химической модели выражается в снижении потенциала ионизации, сдвиге уровней и ограничении числа верхних возбужденных уровней при вычислении статсумм.

При увеличении давления межатомное взаимодействие начинает заметно проявляться при нарушении условия

$$n_{\text{атомов}} b_0^3 \ll 1, \quad (5.2.1)$$

где $b_0 \sim a_0$ радиус атома в основном состоянии. Однако при высоких давлениях и температурах, сравнимых с потенциалом ионизации появляется значительное количество возбужденных атомов. Размер последних может заметно превышать b_0 и поэтому неизолрированность и, в частности, то обстоятельство, что объем, доступный для реализации состояний атома, конечен, сказывается на них в первую очередь. Влияние этого эффекта было продемонстрировано в работе (GRABOSKE et al., 1969), где были проведены расчеты для водорода в приближении ограниченного атома. Этому приближению соответствует потенциал вида

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & 0 < r < r_c \\ \infty & r_c \leq r \end{cases} \quad (5.2.2)$$

Результаты расчетов энергии и возбужденных состояний атома водорода показали, что зависимость энергии возбужденного состояния от конечности атомного объема резко возрастает с увеличением главного квантового числа. Применяя численные методы расчета атомных структур, удается оценить влияние сжатия атомной ячейки на энергетический спектр многоэлектронных атомов, таких как аргон и цезий. Для этого нами был использован метод Хартри–Фока (ХАРТРИ, 1960; ZULICKE, 1973, 1986), который,

в нашем случае, сводится к конечно-разностному решению (ГРЯЗНОВ и др., 1989) интегро-дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + V_{nl}(r) - \varepsilon_{nl} \right] f_{nl}(r) + \int_0^{r_c} X_{nl}(r, s) f_{nl}(s) ds = 0 \quad (5.2.3)$$

относительно радиальных частей f_{nl} одноэлектронных функций

$$\psi_{nlms}(r, \theta, \varphi, \delta) = \frac{f_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_s(\delta), \quad (5.2.4)$$

которые подчиняются условиям нормировки

$$\int_0^{r_c} f_{nl}(r) f_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'} \quad (5.2.5)$$

и граничным условиям

$$f_{nl}(0) = 0; \quad f_{nl}(r_c) = 0, \quad (5.2.6)$$

что очевидно соответствует виду (5.2.2) внутриатомного потенциала. Систему уравнений (5.2.3)–(5.2.56) необходимо решать для всех электронных термов, которые возможны в приближении LS -связи. Для адекватного описания электронной структуры многоэлектронных атомов необходимо учитывать эффекты межэлектронной корреляции, что для наших целей можно сделать в рамках простейшего приближения (ГЛЕМБЬОЦКИЙ, ПЕТКЯВИЧУС, 1973). Рис. (5.2.1) и (5.2.2) иллюстрируют проведенные расчеты для атомов аргона и цезия, где представлены схемы уровней основного и возбужденных состояний в зависимости от радиуса атомной ячейки.

Расчеты показывают, что если основное состояние щелочных металлов начинает «чувствовать» сжатие при относительно больших радиусах (для $Cs \sim 12a_0$) ячейки, то у атомов инертных газов, вследствие компактности электронной структуры их основного состояния, энергия их низшего уровня начинает заметно возрастать при гораздо меньших радиусах. У аргона энергия основного состояния при $5.5a_0$ не сдвигается сколько-нибудь заметно, в то время как энергия первого возбужденного состояния (внешний электрон в состоянии $4s$) превышает ионизационный предел. Рассмотренные примеры показывают, что, несмотря на различие в поведении спектров сжатым атомов, имеется общая закономерность, а именно, что существует диапазон радиусов атомной ячейки, где возрастает энергетическая щель

между основным и возбужденными состояниями по сравнению с изолированными атомами.

Влияние эффекта конечного объема на атомный спектр возбуждений может существенным образом сказываться на термодинамических свойствах плазмы. Следует отметить, что, например, при давлении в 100 бар и температуре 5000 К среднее межчастичное расстояние составляет величину порядка $20a_0$, что лишь в 2–3 раза превышает «характерный размер» основного состояния атома щелочного металла и практически совпадает с размером его первых возбужденных состояний.

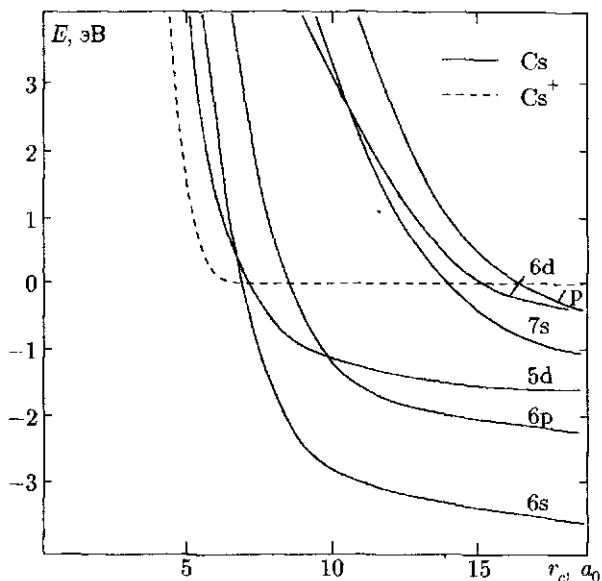


Рис. 5.2.1. Спектр ограниченного атома цезия

Таким образом, по крайней мере, для описания движения внешних электронов, внутриатомный потенциал должен быть эффективно видоизменен, чтобы учесть наличие окружающей атом плазмы. Воспользуемся приближением ограниченного атома, чтобы выяснить, насколько существенно деформация энергетического спектра атома за счет взаимодействия с частицами сказывается на суммарных термодинамических характеристиках неидеальной плазмы.

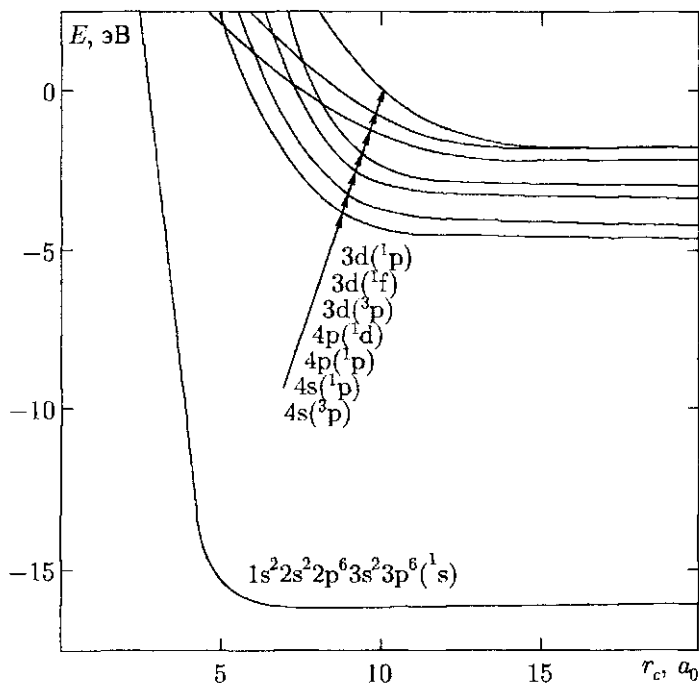


Рис. 5.2.2. Спектр ограниченного атома аргона

Рассмотрим простейший случай трехкомпонентной газовой системы, состоящей из атомов, электронов и однозарядных ионов. Предположим, что атомы имеют форму сфер с радиусом, зависящим от температуры и плотности, а размерами ионов и электронов будем пренебрегать. Подсистему атомов, имеющих конечный размер, будем представлять себе как систему твердых шаров не взаимодействующих, когда расстояние между ними превышает $2r_c$. Свободная энергия такой модельной системы может быть записана в виде

$$F(\{N_j\}, V, T) = F_{id}(\{N_j\}, V, T) + \Delta F_{HS}(\{N_j\}, V, T) + \Delta F_{Coul}(\{N_j\}, V, T). \quad (5.2.7)$$

Первое слагаемое представляет собой свободную энергию идеального газовой

электронейтральной системы атомов, электронов и ионов

$$F_{id} = -k_B T \left[N_a \ln \frac{\sigma_a(r_c)}{n_a \Lambda_a^3} + N_c \ln \frac{2\sigma_i}{n_e^2 \Lambda_i^3 \Lambda_e^3} + (N_a + 2N_e) \right] \quad (5.2.8)$$

с тем отличием, что статсумма атома a в соответствии с граничным условием ограниченного атома (5.2.6) зависит от его радиуса. Второе слагаемое в (5.2.7) является вкладом отталкивания твердых сфер, также зависящим от радиуса r_c через безразмерный параметр упаковки $\eta = n_a(4\pi r_c^3/3)$

$$\Delta F_{HS} = N_a k_B T f(\eta). \quad (5.2.9)$$

Для описания этого вклада воспользуемся выражением из работы (CARNAHAN and STARLING, 1969)

$$f(\eta) = \eta \frac{4 - 3\eta}{(1 - \eta)^2}. \quad (5.2.10)$$

Этому выражению соответствует поправка к давлению

$$\frac{\Delta P_{HS}}{n_a k_B T} = 2\eta \frac{2 - \eta}{(1 - \eta)^3} \cdot \eta f'(\eta) \quad (5.2.11)$$

и химическому потенциалу

$$\frac{\Delta \mu_{HS}}{k_B T} = \eta \frac{3\eta^2 - 9\eta + 8}{(1 - \eta)^3} = f(\eta) + \eta f'(\eta). \quad (5.2.12)$$

Статсумма $\sigma_a(r_c)$ получена суммированием вкладов уровней энергии, вычисленных в приближении ограниченного атома методом Хартри-Фока. Отметим, что поправка ΔP_{HS} , как и статсумма $\sigma_a(r_c)$ являются монотонно возрастающими функциями радиуса атома r_c , вследствие чего зависимость свободной энергии (5.2.7) от радиуса атомной ячейки имеет минимум. Значение r_c , при котором оно достигается, является равновесным радиусом атомов и может быть определено из вариационного принципа статистической механики (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1976):

$$\frac{\partial F}{\partial r_c} = 0. \quad (5.2.13)$$

Выполняя дифференцирование свободной энергии (5.2.7) получим систему уравнений равновесия

$$k_B T [n_a + 2n_e + n_a \eta f'(\eta)] + \Delta P_{Coul} = P_0; \quad (5.2.14)$$

$$r_e \frac{1}{\sigma_a} \frac{\partial \sigma_a}{\partial r_e} = 3\eta f'(\eta); \quad (5.2.15)$$

$$\frac{n_a}{n_e^2} = \frac{\sigma_a(r) \Lambda_e^3}{2\sigma_i} \exp \left[-f(\eta) - \eta f'(\eta) + \frac{2\Delta\mu_e C_{oul}}{k_B T} \right]. \quad (5.2.16)$$

Решая эту систему трансцендентных уравнений относительно n_a , n_e и r_e при помощи изложенных выше методов (раздел 5.1), можно затем найти все термодинамические функции.

Заметим, что равновесное значение радиуса атома зависит от давления и температуры. Эта зависимость является индивидуальной для каждого вещества и определяется видом спектра связанных состояний. Равновесное значение радиуса убывает с ростом давления при постоянной температуре, а при разрежении, сопровождаемом монотонным увеличением радиуса, уравнение состояния приближается к уравнению состояния идеального газа.

5.3. Некоторые результаты и их обсуждение

Одним из важных приложений изложенных выше методов являются расчеты в рамках химической модели плазмы сложного состава в области умеренных плотностей и температур. Такие системы обычно содержат самые различные сорта частиц, а диапазон параметров простирается от газа, состоящего из многоатомных молекул до плазмы с развитой ионизацией и заметной кулоновской неидеальностью. Результаты некоторых расчетов и их обсуждение для этой области параметров содержатся, в частности, в (ГРЯЗНОВ и др., 1980b). Пример такого рода расчетов приведен на рис. 5.3.1, где представлен состав плазмы, представляющей смесь воды и лития.

У нижней границы температурного диапазона смесь представляет собой идеальный газ молекул H_2O , H_2 , OH , O_2 , $LiOH$, атомов H , O , а у верхней это частично ионизованная плазма с развитой кулоновской неидеальностью, состоящая из ионов H^+ , O^+ , Li^+ , электронов и атомов водорода и кислорода.

Имеющаяся экспериментальная информация для обсуждаемой области умеренной неидеальности весьма немногочисленна. Данные по ударно-сжатому цезию (БУШМАН и др., 1975; ЛОМАКИН, ФОРТОВ, 1972) и инертным газам (БЕСЦАЛОВ и др., 1975; ФОРТОВ и др., 1976; ГРЯЗНОВ и др., 1980a) являются наиболее детальными, поэтому используем их

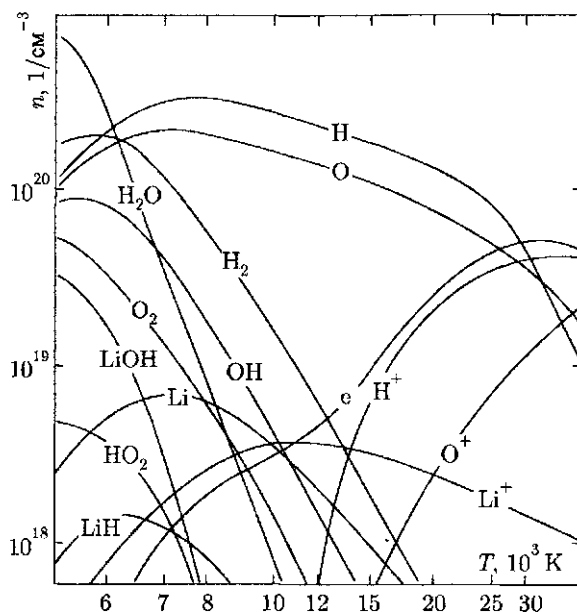


Рис. 5.3.1. Состав плазмы, состоящей из смеси 97 % воды и 3 % лития при 100 МПа

для количественного сравнения с данными расчетов, полученных при помощи изложенных выше методов. Наиболее точные данные по цезию, полученные на ударной трубе (БУШМАН и др., 1975) охватывают область по температурам от 2600 К до 20000 К и давлениям от 0.2 до 20 МПа. Химическая модель позволяет в целом правильно с расхождением не более 20 %, как по термическому, так и calorическому уравнению состояния, описать экспериментальные данные. Однако существующее расхождение химической модели с экспериментами в calorическом уравнении состояния, выходящее за пределы экспериментальной погрешности, не удается ликвидировать в рамках традиционных подходов, выбирая какую-либо из кулоновских поправок на неидеальность и известные способы расчета статсумм, вычисленных по уровням энергии изолированного атома. В то же время неожиданно хорошим оказалась совпадение с экспериментом расчетов по идеальноегазовому приближению со статсуммой, равной g_0 (статвес основного состояния), не имеющему никакого корректного обоснования. Тем не менее такое совпадение позволило в экспериментальных работах

(БУШМАН и др., 1975; ЛОМАКИН, ФОРТОВ, 1972) сделать предположение о появлении в системе дополнительного отгалкивания, не учитываемого традиционными подходами (НОРМАН, СТАРОСТИН, 1970), и резком уменьшении вклада дискретного спектра, связанного с деформацией энергетических уровней при высоких плотностях. Аналогичное поведение термодинамических величин было выявлено и в экспериментах по инертным газам и, в частности, по аргону (БЕСПАЛОВ и др., 1975; ФОРТОВ и др., 1976; ГРЯЗНОВ и др., 1980b), где температуры достигали 30000К, а плотности околокритических значений.

Расчеты методом Хартри–Фока в приближении ограниченного атома, приведенные выше, показали большую чувствительность атома цезия к сжатию, а отсюда можно предположить, что эффект деформации дискретного спектра должен проявляться на цезии при меньших плотностях, чем на аргоне. Именно так и обстоит дело в действительности.

Вышеуказанные отличия традиционных расчетов от экспериментальных данных проявляются в Cs при межчастичном расстоянии $20a_0$, а в аргоне при расстояниях менее $10a_0$. Расчеты, проведенные с применением модели ограниченного атома, описанной выше, показывают, что эффекты деформации спектра в первую очередь проявляются в той области, где заметна доля атомов. Это отчетливо видно на примере Cs (рис. 5.3.2а, б).

Использование данной модели заметно улучшает согласие с экспериментом в нижней части достигнутого в эксперименте температурного диапазона, где степень ионизации велика. В области развитой ионизации необходимо более детально рассматривать кулоновские поправки.

Расчеты, проведенные с использованием модели (5.2.4)–(5.2.11) в сочетании с приближением (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980) для описания кулоновской неидеальности, позволили удовлетворительно описать эксперимент во всей исследованной в (БУШМАН и др., 1975; ЛОМАКИН, ФОРТОВ, 1972) области. Кроме согласия в калорическом уравнении состояния модель ограниченного атома с дополнительным учетом кулоновских поправок позволяет добиться удовлетворительного согласия и в термическом уравнении состояния (рис. 5.3.3). Отметим, что отличительной особенностью как модели ограниченного атома, так и приближения (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980) по сравнению с традиционным расчетом плазмы является наличие эффективного межчастичного отталкивания.

Методы, изложенные в разделе 5.1, позволяют использовать различные модели плазмы, принимая во внимание всевозможные плазменные эффекты. На этом основаны попытки распространить химическую модель плазмы за пределы области ее традиционного применения и, в частности, на область ультравысоких давлений и температур (ГРЯЗНОВ и др., 1982; ГРЯЗ-

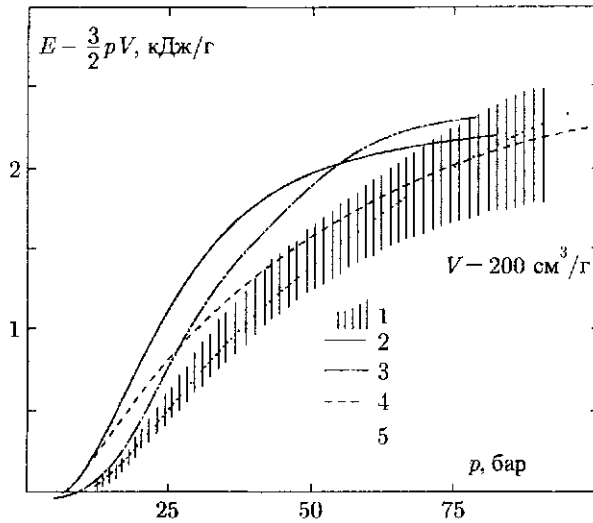


Рис. 5.3.2а Калорическое уравнение состояния цезия на изохоре $V = 200 \text{ см}^3/\text{г}$: Затенена полоса ((5%) для сглаженной экспериментальной зависимости $H(P, V)$ (БУШМАН и др., 1975); 1 – расчет в приближении (ЛИКАЛЬТЕР, 1969), атомы–идеальная подсистема; 2 – модель ограниченного атома с приближением (ЛИКАЛЬТЕР, 1969) для заряженных частиц; 3 – расчет в приближении (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980) для взаимодействия зарядов; 4 – расчет в приближении ограниченного атома с приближением (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980) для заряженной подсистемы

НОВ, ФОРТОВ, 1987) Для этого оказалось необходимо учесть такие термодинамические эффекты, как многократная ионизация, электронное возбуждение, кулоновское взаимодействие между заряженными частицами, короткодействующее отталкивание атомов и ионов, вырождение электронов. Такие состояния были реализованы в экспериментах по сверхмощному ударному сжатию пористых образцов меди (КОРМЕР и др., 1962; ЗУБАРФВ и др., 1978) (температуры до $5 \cdot 10^5 \text{ К}$, давления до 20 Мбар, удельные плотности энергии до 75 МДж/г), и алюминия (АВРОРИН и др., 1986; СИМОНЕНКО и др., 1985) (температуры до $7 \cdot 10^6 \text{ К}$, давления до 400 ТПа, удельные плотности энергии до 60 МДж/г).

В соответствии с химической моделью плазма состояла из атомов электронов и ионов. Атомы и ионы рассматривались как бoльцмановские частицы с радиусами r_2 . Свободная энергия такой системы представляла собой

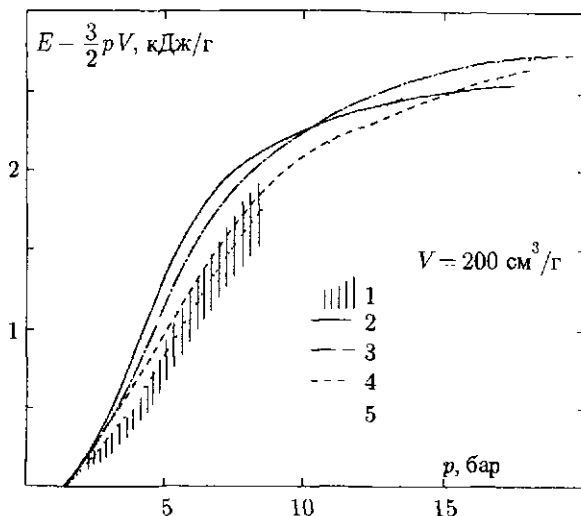


Рис. 5.3.2б. Калорическое уравнение состояния цезия на изохоре $V = 1000 \text{ см}^3/\text{г}$. Пояснения к условным обозначениям смотрите на рис. 5.3.2а

сумму

$$F \equiv F_{id}^e + F_{id}^n + F_{Coul} + F_{HS}. \quad (5.3.1)$$

Первое слагаемое — вклад идеального вырожденного электронного газа

$$F_{id}^e = N_e k_B T \left[\alpha_e - \frac{I_{3/2}(\alpha_e)}{I_{1/2}(\alpha_e)} \right], \quad (5.3.2)$$

где I — функции Ферми-Дирака, а безразмерный химический потенциал $\alpha_e = \mu_e/k_B T$ определялся из соотношения $I_{1/2}(\alpha_e) = n_e \Lambda_e^3/2$. Вклад идеального газа тяжелых частиц представлен вторым слагаемым

$$F_{id}^n = \sum_j N_j k_B T \left(\ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right). \quad (5.3.3)$$

В (5.3.3) статсуммы определялись выражением (ЛАРКИН, 1960)

$$\sigma_j = \sum_n g_n^j \left[\exp \left(\frac{E_n^j}{k_B T} \right) - 1 + \frac{E_n^j}{k_B T} \right]. \quad (5.3.4)$$

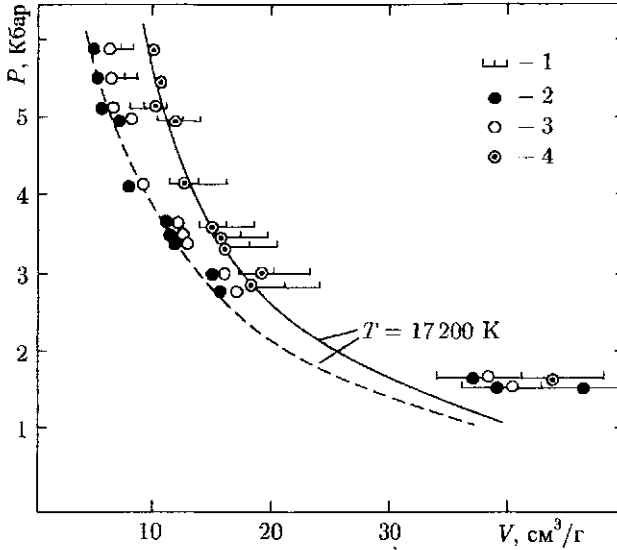


Рис. 5.3.3. Термическое уравнение состояния ударно-сжатого аргона 1 — результаты эксперимента (БЕСПАЛОВ и др., 1975); 2, 3, — расчет для каждой экспериментальной точки $V(P_{\text{экр}}, T_{\text{экр}})$; приближения: 2 — кольцевое (дебаевское) приближение в большом каноническом ансамбле (ЛИКАЛЬТЕР, 1969) для заряженных частиц; 3 — расчет в приближении ограниченного атома с приближением (ЛИКАЛЬТЕР, 1969) для заряженной подсистемы

Кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле (ЛИКАЛЬТЕР, 1969), обобщенного на случай многократной ионизации:

$$\frac{\Omega}{Vk_B T} \equiv \frac{F - \sum N_j \mu_j}{Vk_B T} \equiv \frac{P}{k_B T} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} - \frac{\tilde{\kappa}_D^3}{24\pi} = - \sum_{\alpha} \left[n_{\alpha} - \frac{\tilde{\Gamma}_D}{6} \frac{n_{\alpha} z_{\alpha}^2}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D / 2} \right], \quad (5.3.5)$$

где суммирование осуществляется по всем заряженным частицам, а параметр $\tilde{\Gamma}_D$ определяется, как корень уравнения

$$\tilde{\Gamma}_D^2 = \left(\frac{e^2}{k_B T \tilde{r}_D} \right)^2 = 4\pi \left(\frac{e^2}{k_B T} \right)^3 \sum_{\alpha} \frac{z_{\alpha}^2 n_{\alpha}}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D / 2}. \quad (5.3.6)$$

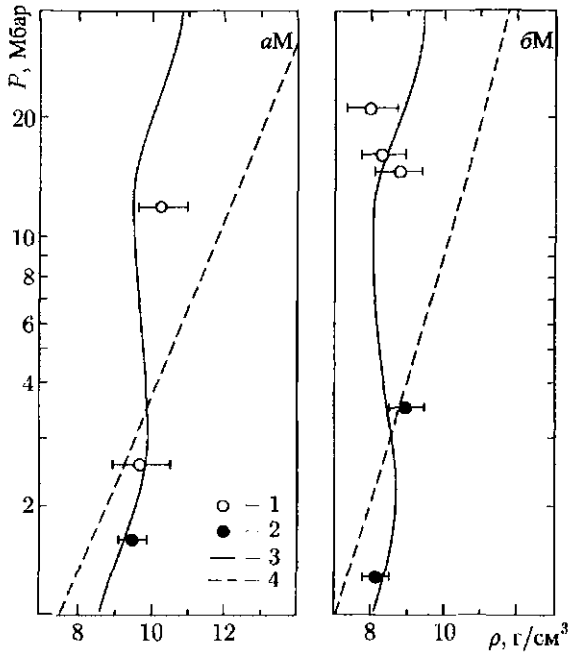


Рис. 5.3.4. Сжатие пористой меди при $m = \rho_{00}/\rho_0 = 3$ (а) и $m = 4$ (б) интенсивными ударными волнами: 1) эксперимент (КОРМЕР и др., 1962); 2) эксперимент (ЗУБАРЕВ и др., 1978); 3) модель Томаса-Ферми (КАЛИТКИН, 1960); 4) данная модель (5.3.1)-(5.3.8)

Короткодействующее отталкивание атомов и ионов, описывалось в приближении твердых сфер (5.2.9)-(5.2.12). Эффективные радиусы r_c оценивались из предварительно проведенных расчетов методом Хартри-Фока для атомов и ионов меди и алюминия. Для меди эти радиусы выбирались одинаковыми для всех ионов $r_i = r_c = 1.75a_0$, что примерно соответствовало радиусу пятикратного иона Cu^{5+} . Для алюминия средний для всех ионов радиус определялся из соотношения

$$r_c = \frac{\sum_{i=1}^L n_i r_i}{\sum_{j=2}^L n_j}, \quad (5.3.7)$$

а радиусы ионов алюминия выбирались начиная с $2.5a_0$ для атома до 0 для тринадцатикратного иона Al^{13+} в соответствии с результатами расчета их структуры методом Хартри-Фока.

Зависимость r_c от плотности определяла соответствующий вид конфигурационной части химического потенциала

$$\frac{\mu_i^{HS}}{k_B T} = f_{HS}(\eta) + \eta f'_{HS}(\eta) \left[\frac{3(r_i - r_c)}{r_c} + 1 \right], \quad (5.3.8)$$

что приводило к увеличению степени ионизации по сравнению со случаем одинаковых значений радиуса для всех частиц $r_i = r_c = \text{const}$.

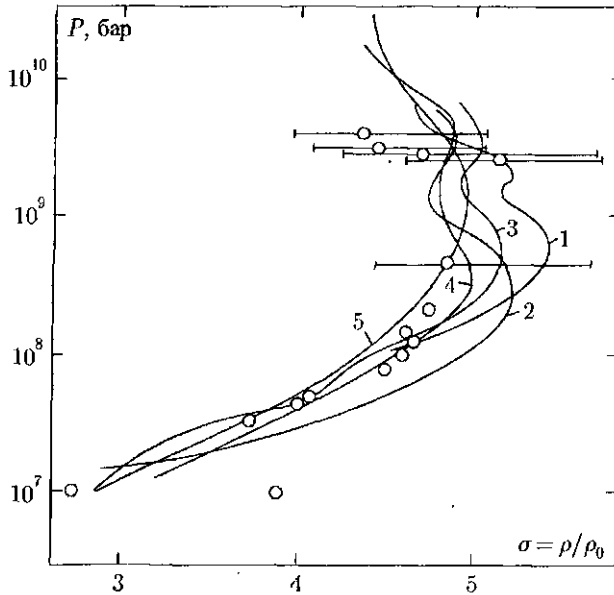


Рис. 5.3.5. Ударная адиабата алюминия в сравнении с экспериментальными данными: 1) модель INFERNO (YOUNG et al., 1985); 2) модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера (НОВИКОВ, 1985); 3) данная модель (5.3.1)–(5.3.8); 4) модель самосогласованного поля (СИНЬКО, 1983); 5) модель Томаса–Ферми с квантовыми поправками и обменными поправками (КАЛИТКИН, 1960); 6) эксперимент (АВРОРИН и др., 1986; СИМОНЕНКО и др., 1985)

На рис. 5.3.4а, б приведено сравнение расчета ударных адиабат меди с экспериментальными данными (КОРМЕР и др., 1962; ЗУБАРЕВ и др.,

1978) и расчетами методом Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками (КАЛИТКИН, 1960).

Расчеты позволили определить, какая из модификаций химической модели наиболее существенно влияет на результаты. Как и ожидалось, наиболее существенным является учет короткодействующего отталкивания между ионами, в отсутствие которого расчетные плотности значительно меньше измеренных значений. Менее радикальным, хотя и существенным, является учет кулоновской неидеальности (ЛИКАЛЬТЕР, 1969) и вклада возбужденных состояний, что и в том и в другом случае приводит к увеличению расчетной плотности ударного сжатия. Наконец, наименее заметно влияет на положение ударной адиабаты учет вырождения электронов. Подобный расчет проведен и для ударно-сжатого алюминия, что иллюстрирует рис. 5.3.5, на котором наряду с экспериментом представлены данные, полученные по другим моделям.

Заметим, что представленные данные по ударно-сжатым меди и алюминию лежат в области, далеко выходящей за пределы традиционного диапазона применения химической модели плазмы.

ГЛАВА 6

Ионизационное равновесие и неравновесные свойства металлической плазмы

6.1. Общий подход и модель Томаса–Ферми

В предыдущих главах мы рассмотрели различные методы расчета состава плазмы легких элементов, металлов и инертных газов. Модель ограниченного атома также позволяет рассчитать ионизационное равновесие в металлах, но часто на практике она оказывается весьма сложной в реализации.

В данной главе будут приведены методы, которые можно использовать для расчета многих видов ионизированной металлической плазмы в широком диапазоне параметров: от значений плотности, характерных для газов, до значений плотности, присущих веществам в твердом состоянии, от комнатной температуры до температуры в десятки электрон-вольт. Все подходы отличаются меньшей вычислительной трудоемкостью, по сравнению с квантово-статистическими методами, химической моделью и моделью ограниченного атома, поэтому они широко применяются на практике. Самым простейшим подходом является построение аналитических выражений, которые можно использовать для математического моделирования сложных физических процессов, например, в гидродинамических расчетах.

В первом разделе настоящей главы речь пойдет о составе плазмы, на основе которой рассчитываются коэффициенты переноса электронов. В последнем разделе мы рассмотрим кулоновские столкновения в плотной плазме и метод расчета тепло- и электропроводности. Для оценки справедливости предлагаемых моделей мы сравним результаты их расчета с экспериментальными данными. Начнем с метода, основанного на модели Томаса–Ферми и ее обобщения.

Данная квазиклассическая модель описывает электронную систему во внешнем поле, впервые ее предложили Томас (THOMAS, 1926) и Фер-

ми (FERMI, 1928), затем она была применена для описания сжатой материи (FEYNMAN et al., 1949; GOMBAS, 1949; LETTER, 1955). Впоследствии была построена усовершенствованная модель Томаса–Ферми–Дирака за счет того, что в ней стали учитывать эффекты обменного взаимодействия электронов (DIRAC, 1930). Первыми сделали это Коуэн и Эшкин (COWAN and ASHKN, 1957). Компанец и Павловский (КОМПАНИЕЦ, ПАВЛОВСКИЙ, 1956), а затем Киржниц (КИРЖНИЦ, 1957, 1958) доказали, что значения поправки по отношению к классическому выражению имеют порядок \hbar^2 , поэтому градиентные поправки к значению кинетической энергии также должны быть порядка \hbar^2 . Киржниц (КИРЖНИЦ, 1957, 1958, 1967) показал, как можно вывести аппроксимацию Томаса–Ферми на основе разложения по \hbar^2 из приближения Хартри–Фока. Как оказалось, при рассмотрении электронов в кулоновском поле положительно заряженного ядра квантовая поправка к значению энергии расходится, что делает невозможным применение рассматриваемой теории для подобных систем. Чтобы избежать расходимости, Киржниц (КИРЖНИЦ, 1957) предложил использовать градиентные квантовые поправки, которые бы имели тот же порядок, что и член Томаса–Ферми. В качестве значений поправок выступают корни уравнения теории возмущений, форма которого соответствует выражению поправок с учетом \hbar^2 . Данное уравнение, по предложению Киржница, необходимо решать вместо уравнения, которое соответствует разложению до \hbar^2 и неприменимо на малых расстояниях от ядра. Такой подход, называемый квантово-статистической моделью Киржница, позволяет избежать расходимостей (КИРЖНИЦ, 1967; КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1971).

При построении модели Киржниц (КИРЖНИЦ, 1961) исходил из вариационного принципа для функционала энергии электронов во внешнем поле при нулевой температуре, впоследствии его идею развили Калиткин и Кузьмина (КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1971). Перро (PERROT, 1979) построил выражение для функционала кинетической энергии порядка \hbar^2 для случая конечных температур, а Полищук (ПОЛИЩУК, 1986) получил выражение функционала до порядка \hbar^4 . В уравнении состояния ядерной материи как раз фигурирует разложение до четвертого порядка по \hbar (BRACK et al., 1985).

Модель Томаса–Ферми, а также ее обобщенная форма, известная как квантостатистическая модель Киржница, представляют собой частный случай подхода, известного под названием теории функционала плотности (Hohenberg and Kohn, 1964; Kohn and Sham, 1965; Mermin, 1965). Данный подход основан на строгой теореме, согласно которой в состоянии равновесия термодинамический потенциал системы взаимодействующих частиц, находящихся во внешнем поле, равен минимальному значению

нию функционала пространственного распределения плотности числа частиц, которая находится из решения вариационной задачи. Современное состояние метода функционала плотности, а также некоторые аспекты его применения можно найти в книге LUNDQVIST and MARCH (1983). В отличие от оригинальной работы Hohenberg and Kohn (1964), в основе работы Kohn and Sham (1965) лежит идея об универсальном характере плотности, а метод функционала плотности сводится к решению системы одночастичных уравнений Шредингера с самосогласованным потенциалом. Данная идея по существу возвращается к идее Слэтера (Slater, 1974), реализацию которой и составляет метод Хартри-Фока-Слэтера.

В главах 6 и 7 будет рассматриваться атомная система единиц, для которой $\hbar = m = e = 1$. Рассмотрим систему электронов во внешнем поле $U(\mathbf{r})$. Неравновесный термодинамический потенциал $\Omega_{int}[n(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})]$, являющийся функционалом плотности электронов $n(\mathbf{r})$, будет иметь вид:

$$\Omega_{int}[n(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})] = F_{int}[n(\mathbf{r})] + \int \{U(\mathbf{r}) - \mu\}n(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (6.1.1)$$

где $F_{int}[n(\mathbf{r})]$ — функционал свободной энергии с учетом равновесного распределения по отношению к плотности электронов, μ — химический потенциал. Фигурирующие в уравнении (6.1.1) функции $n(\mathbf{r})$ и $U(\mathbf{r})$ являются независимыми. Мермин (Mermin, 1965) доказал, что равновесное распределение по $n(\mathbf{r})$, соответствующее внешнему полю $U(\mathbf{r})$, можно определить минимизацией функционала (6.1.1) по $n(\mathbf{r})$. Если между электронами отсутствует взаимодействие, равновесная свободная энергия $F[n(\mathbf{r})]$ также является функционалом плотности, что позволяет нам ввести понятие функционала обменно-корреляционной энергии $F_{xc}[n(\mathbf{r})]$:

$$F_{int}[n(\mathbf{r})] = F[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + F_{xc}[n(\mathbf{r})]. \quad (6.1.2)$$

Из-за квантовой природы частиц функционалы $F[n(\mathbf{r})]$ и $F_{xc}[n(\mathbf{r})]$ оказываются нелокальными, т. е. их можно разложить в градиентный ряд по $n(\mathbf{r})$. В квантовой механике дифференциальный оператор ∇ определяет оператор импульса $-i\hbar\nabla$ и, следовательно, градиентное разложение физических параметров представляет собой разложение в ряд по \hbar^2 . Значения физических параметров должны быть реальными.

Простейшим приближением является приближение локальной плотности. В главе 3 мы описывали аппроксимации Якоби-Паде для расчета обменно-корреляционной составляющей свободной энергии однородно-

го электронного газа F_{xc} для разных значений температуры T и плотности n . Заметим, что в приближении локальной плотности обменно-корреляционная составляющая имеет порядок \hbar^2 относительно свободной энергии невзаимодействующих электронов. Таким образом, функционал $F[n(\mathbf{r})]$ должен содержать градиентные поправки второго порядка относительно ∇ .

В своих работах Ма и Брукнер (MA and BRUECKNER, 1968), а также Гелдарт и Расолт (GELDART and RASOLT, 1976) рассматривали градиентные поправки к обменно-корреляционной энергии при нулевой температуре. Существуют довольно противоречивые мнения относительно того, какими должны быть значения градиентных поправок. Ма и Брукнер (MA and BRUECKNER, 1968) полагали, что градиентные поправки к обменно-корреляционной энергии лишь ухудшают качество расчетов. Гупта и Сингви (GUPTA and SINGWI, 1977) пришли к выводу, что использование первой градиентной поправки ведет к получению адекватного описания обменно-корреляционной энергии. В последнее время изучалась возможность применения градиентных поправок к обменно-корреляционной энергии более высокого порядка (LANGRETT and MENL, 1983; PERDEW, 1985).

Чтобы включить в выражение для обменно-корреляционной энергии градиентные поправки более высокого порядка, необходимо также включить соответствующие поправки в выражение для функционала кинетической энергии. Если обменно-корреляционная составляющая содержит поправки второго порядка относительно \hbar , необходимо также включить в соответствующее выражение поправки до четвертого порядка относительно \hbar . В случае нулевой температуры Мерфи (MURPHY, 1981) построил градиентное разложение кинетической энергии вплоть до шестого порядка относительно \hbar .

Метод функционала плотности гораздо проще представить на основе градиентного представления, нежели одночастичного представления Кона-Шема. Что касается учета оболочечной структуры, характерной для атомов, то можно сказать, что при высоких температурах и в системах с низким уровнем симметрии оболочечные эффекты сводятся на нет. К настоящему моменту вопрос сходимости градиентного разложения и справедливости предположения, согласно которому оно имеет асимптотический характер, остается открытым. В любом случае можно надеяться, что сходимость градиентного разложения при $T > 0$ лучше, чем при нулевой температуре.

Одним из возможных способов повышения надежности рассматриваемой теории является использование в вариационной процедуре пробных функций, выбранных из ограниченного класса. Аналогичным образом ви-

димо можно описать и влияние оболочечной структуры (WANG and PARR, 1977).

В литературных источниках описывается также возможность использования усеченного градиентного разложения, когда ряд разложения кинетической энергии обрывается на определенном члене. С этой целью Ма и Сани (MA and SANI, 1977) рассматривали электронный газ во внешнем поле, которое является постоянным в левой половине пространства и описывается линейной функцией в правой половине пространства. Затем они сравнили точные значения параметров системы с теми, которые были получены на основе приближенного расчета. Другие исследователи (PLUMER and GELDART, 1983) решали конкретную задачу, связанную с исследованием поверхностного натяжения в металлах. Они пришли к выводу, что наилучших результатов можно достигнуть, если оборвать градиентное разложение на члене, который содержит \hbar в четвертой степени. При этом обменно-корреляционные составляющие будут содержать лишь первую градиентную поправку. К аналогичному выводу также пришли при исследовании уравнения состояния ядерной материи (WANG and RASSOLDT, 1976; BRACK et al., 1985). Особый интерес представляет для нас разложение функционала кинетической энергии четвертого порядка относительно \hbar , которое получил Киржниц (КИРЖНИЦ, 1961) для случая нулевой температуры, поскольку его можно применить для произвольных значений температуры. Данную возможность исследовали в свое время Гелдарт и Зоммер (GELDART and SOMMER, 1985) и независимо от них Полищук (ПОЛИЩУК, 1986, 1987).

На сегодняшний день не построено градиентного разложения обменно-корреляционной энергии для конечных значений температуры. В этой связи обратим внимание на статьи (CEDILLO et al., 1988; BECKE, 1988, которые предложили метод приближенного построения градиентного разложения обменной энергии непосредственно из градиентного разложения кинетической энергии при $T = 0$.

Рассмотрим более подробно функционал свободной энергии $F[n(\mathbf{r})]$, определенный в уравнении (6.1.2), для неравновесного термодинамического потенциала (ПОЛИЩУК, 1986, 1987).

Выразим термодинамические характеристики невзаимодействующих электронов через локальную плотность состояний $\rho(\mathbf{r}, E)$ частицы во внешнем поле $U(\mathbf{r})$ (\mathbf{r} — радиус-вектор, определяющий положение частицы; E — энергия). Локальная плотность состояний равна:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = 2 \int \frac{dp}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \delta\left[E - \frac{\Delta}{2} - U(\mathbf{r})\right] e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}}. \quad (6.1.3)$$

Определим функцию распределения Ферми для энергии частицы E при температуре $T = 1/\beta$ и заданном значении химического потенциала μ :

$$f_F(E - \mu) = \frac{1}{1 + \exp[\beta(E - \mu)]} \quad (6.1.4)$$

и построим выражение для плотности распределения числа частиц

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} f_F(E - \mu) \rho(\mathbf{r}, E) dE. \quad (6.1.5)$$

Теперь выведем уравнение для термодинамического потенциала Ω , воспользовавшись следующим термодинамическим соотношением:

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V} = -N(T, V, \mu), \quad (6.1.6)$$

где $N(T, V, \mu)$ — число частиц в объеме V при температуре T и значении химического потенциала частиц μ . При $\mu \rightarrow -\infty$ получаем бесконечно разреженный идеальный газ с $\Omega = 0$. Это следует из того факта, что при фиксированных значениях объема и температуры снижение давления до нуля ведет к снижению плотности числа частиц и, следовательно, значение параметра $\Omega = -pV$ стремится к нулю. Уравнение (6.1.6) сводится к решению интегрального уравнения

$$\Omega(T, V, \mu) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\mu' N(T, V, \mu'). \quad (6.1.7)$$

Принимая во внимание, что общее число частиц N связано с локальной плотностью $n(\mathbf{r})$ соотношением

$$N = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}), \quad (6.1.8)$$

и подставляя в уравнение (6.1.8) выражение для $n(\mathbf{r})$ через локальную плотность состояний, получаем:

$$\Omega(T, V, \mu) = \int \omega(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (6.1.9)$$

Плотность термодинамического потенциала равна:

$$\begin{aligned}\omega(\mathbf{r}) &= - \int_{-\infty}^{\infty} f_F(E - \mu) \Gamma(\mathbf{r}, E) dE, \\ \Gamma(\mathbf{r}, E) &= \int_{-\infty}^E \rho(\mathbf{r}, E_1) dE_1.\end{aligned}\tag{6.1.10}$$

Очевидно, что раскладывая δ -функцию в ряд по степеням градиентов (или степеням \hbar), получаем градиентное разложение всех термодинамических величин. Методика данного разложения была описана Киржницем (КИРЖНИЦ, 1967). Обратим внимание на тот факт, что локальная плотность состояний $\rho(\mathbf{r}, E)$ для невзаимодействующих частиц не зависит от температуры.

При нулевой температуре все состояния в газе Ферми с энергией ниже энергии Ферми являются заполненными. Следовательно, величина $\Gamma(\mathbf{r}, E)$ соответствует такому выражению локальной плотности $n(\mathbf{r}, E, T = 0)$ частиц при нулевой температуре, при котором химический потенциал равен E . Киржниц (КИРЖНИЦ, 1967) очень детально исследовал случай нулевой температуры. Выражения для $n(\mathbf{r}, E, T = 0)$ и $\Gamma(\mathbf{r}, E)$ можно найти в этой работе (уравнение 5.24 там же). Дифференцируя функцию $\Gamma(\mathbf{r}, E)$, приходим к следующему соотношению для $\rho(\mathbf{r}, E)$:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}, E) &= \text{Re} \frac{1}{\pi^2} \left\{ [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{1/2} - \frac{1}{24} \Delta p_E^2(\mathbf{r}) [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-3/2} - \right. \\ &\quad - \frac{1}{32} [\nabla p_E^2(\mathbf{r})]^2 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-5/2} + \\ &\quad + \frac{1}{160} \Delta^2 p_E^2(\mathbf{r}) [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-5/2} - \\ &\quad - \frac{5}{384} [\Delta p_E^2(\mathbf{r})]^2 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-7/2} - \\ &\quad - \frac{1}{32} \nabla p_E^2(\mathbf{r}) \nabla \Delta p_E^2(\mathbf{r}) [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-7/2} - \\ &\quad - \frac{1}{96} [\nabla_i \nabla_k p_E^2(\mathbf{r})]^2 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-7/2} + \\ &\quad \left. + \frac{35}{768} \Delta p_E^2(\mathbf{r}) [\nabla p_E^2(\mathbf{r})]^2 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-9/2} + \right\}\end{aligned}\tag{6.1.11}$$

$$+ \frac{7}{256} \nabla p_E^2(\mathbf{r}) \nabla [\nabla p_E^2(\mathbf{r})]^2 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-9/2} - \\ - \frac{315}{6144} [p_E^2(\mathbf{r})]^4 [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{-11/2} \Big\},$$

где

$$p_E^2(\mathbf{r}) = 2m[E - U(\mathbf{r})]. \quad (6.1.12)$$

Введем понятие локального химического потенциала, приходящегося на единицу температуры,

$$\eta(\mathbf{r}) = \beta[\mu - U(\mathbf{r})]. \quad (6.1.13)$$

С учетом тождества

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE f_F(E - \mu) \frac{d^\alpha}{dE^\alpha} [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{1/2} = \\ = \beta^\alpha \frac{\delta^\alpha}{\delta \eta^\alpha(\mathbf{r})} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_F(E - \mu) [p_E^2(\mathbf{r}) + i0]^{1/2}, \quad (6.1.14)$$

приходим к следующему результату интегрирования уравнения (6.1.5):

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \beta^{-3/2} \left\{ I_{1/2}(\eta) + \right. \\ + \left\{ \frac{\beta}{12} \Delta \eta I_{1/2}''(\eta) + \frac{\beta}{24} |\nabla \eta|^2 I_{1/2}'''(\eta) \right\} + \\ + \left\{ \frac{\beta^2}{240} \Delta^2 \eta I_{1/2}''''(\eta) + \beta^2 \left[\frac{1}{288} (\Delta \eta)^2 + \frac{1}{120} \nabla \eta \nabla \Delta \eta + \right. \right. \\ + \left. \frac{1}{360} (\nabla_i \nabla_k \eta)^2 \right] I_{1/2}^{(4)}(\eta) + \beta^2 \left[\frac{1}{288} \Delta \eta (\nabla \eta)^2 + \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{480} \nabla \eta \nabla (\nabla \eta)^2 \right] I_{1/2}^{(5)}(\eta) + \frac{\beta^2}{1152} (\nabla \eta)^4 I_{1/2}^{(6)}(\eta) \right\} \Big\}. \quad (6.1.15)$$

Уравнение (6.1.15) можно рассматривать как уравнение для $\eta(\mathbf{r})$, решение которого представляется разложением в ряд по степеням градиента

$$\eta(\mathbf{r}) = \eta_0 + \eta_2 + \eta_4 + \dots \quad (6.1.16)$$

Значение индекса характеризует порядок соответствующего градиентного члена ряда. Решение уравнения (6.1.15) сводится к виду:

$$\frac{n(\mathbf{r})\pi^2\beta^{3/2}}{\sqrt{2}} = I_{1/2}\{n_0(\mathbf{r})\}, \quad (6.1.17a)$$

$$\eta_2 = - \left[\frac{\beta}{24} \Delta \eta_0 I_2 + \frac{\beta}{24} (\nabla \eta_0)^2 I_3 \right], \quad (6.1.17b)$$

$$\begin{aligned} \eta_4 = & (\Delta \eta_0)^2 \left[-\frac{3}{288} I_2^3 - \frac{1}{288} I_4 + \frac{1}{72} I_2 I_3 \right] \beta^2 + \\ & + (\nabla \eta_0)^4 \left[-\frac{1}{128} I_2 I_3^2 + \frac{1}{192} I_3 I_4 + \frac{1}{288} I_2 I_5 - \right. \\ & \left. - \frac{1}{144} I_2^2 I_4 + \frac{1}{144} I_2^3 I_3 - \frac{1}{1152} I_6 \right] \beta^2 + \\ & + \Delta \eta_0 (\nabla \eta_0)^2 \left[-\frac{5}{144} I_2^2 I_3 + \frac{1}{72} I_2 I_4 + \frac{1}{96} I_3^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{72} I_2^4 - \frac{1}{288} I_5 \right] \beta^2 + \nabla \eta_0 \nabla \Delta \eta_0 \left[\frac{1}{48} I_2 I_3 - \right. \\ & \left. - \frac{1}{180} I_4 - \frac{1}{72} I_2^3 \right] \beta^2 + \nabla \eta_0 \nabla (\nabla \eta_0)^2 \left[\frac{1}{144} I_2 I_4 - \right. \\ & \left. - \frac{1}{144} I_2^2 I_3 + \frac{1}{288} I_3^2 - \frac{1}{480} I_5 \right] \beta^2 + \\ & + \Delta (\nabla \eta_0)^2 \left[\frac{1}{288} I_2 I_3 - \frac{1}{720} I_4 \right] \beta^2 + \\ & + \Delta^2 \eta_0 \left[\frac{1}{144} I_2^2 - \frac{1}{240} I_3 \right] \beta^2, \end{aligned} \quad (6.1.17c)$$

где I_k (k — целое число) — отношение k -ой производной функции Ферми–Дирака $I_{1/2}(\eta)$ к ее первой производной.

Уравнения (6.1.16)–(6.1.17с) представляют собой уравнения квантово-статистической модели для плотности электронов $n(r)$ во внешнем поле. Уравнение (6.1.17а) реализует температурную модель Томаса–Ферми, а остальные уравнения представляют собой обобщение результатов Киржница (КИРЖНИЦ, 1961) для конечных значений температуры.

Для расчета термодинамических свойств системы недостаточно решить уравнения (6.1.16)–(6.1.17с) для случая равновесного распределения плотности частиц. Необходимо также найти значение функционала $F[n(\mathbf{r})]$, фигурирующего в уравнении (6.1.2) (ПОЛИЩУК, 1987). В этом случае уравнения (6.1.16)–(6.1.17с) выводятся на основе вариационного принципа для неравновесного термодинамического потенциала невзаимодействующих электронов:

$$\Omega[n(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})] = F[n(\mathbf{r})] + \int [U(\mathbf{r}) - \mu]n(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (6.1.18)$$

С учетом выражений (6.1.9) и (6.1.12) уравнение (6.1.18) сводится к виду:

$$\begin{aligned} f[n(\mathbf{r})] &= \omega[n(\mathbf{r})] + n(\mathbf{r})\frac{\eta(\mathbf{r})}{\beta}, \\ F[n(\mathbf{r})] &= \int f[\eta(\mathbf{r})]d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (6.1.19)$$

Вычисляя интеграл (6.1.10) с учетом тождества (6.1.14), приходим к разложению параметра ω в ряд по увеличивающимся степеням градиента функции $\eta_0(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_0 + \omega_2 + \omega_4, \\ \omega_0 &= -\frac{2^{3/2}}{3\pi^2}\beta^{-5/2}I_{3/2}(\eta), \\ \omega_2 &= -\frac{2^{1/2}}{\pi^2}\beta^{-3/2}\left[\frac{1}{12}\Delta\eta I'_{1/2}(\eta) + \frac{1}{24}(\nabla\eta)^2 I''_{1/2}(\eta)\right], \\ \omega_4 &= -\frac{2^{1/2}}{\pi}\beta^{-3/2}\left[\frac{\beta}{240}\Delta^2\eta I''_{1/2}(\eta) + \beta\left(\frac{1}{288}(\nabla\eta)^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{120}\nabla\eta\nabla\Delta\eta + \frac{1}{360}(\nabla_i\nabla_k\eta)^2\right) I'''_{1/2}(\eta) + \beta\left(\frac{1}{288}\Delta\eta(\nabla\eta)^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{480}\nabla\eta\nabla(\nabla\eta)^2\right) I^{(4)}_{1/2}(\eta) + \frac{\beta}{1152}(\nabla\eta)^4 I^{(5)}_{1/2}(\eta)\right]. \end{aligned} \quad (6.1.20)$$

Учитывая соотношение между $\eta(\mathbf{r})$ и $\eta_0(\mathbf{r})$ согласно уравнениям (6.1.16)–(6.1.17с), а также термодинамическое тождество

$$n(\mathbf{r}) = -\beta\frac{\partial\omega_0[n_0(\mathbf{r})]}{\partial\eta(\mathbf{r})}, \quad (6.1.21)$$

можно вычислить значение плотности свободной энергии $f[\eta(\mathbf{r})]$, выраженной через градиенты $\eta_0(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}
 f &= f_0 + f_2 + f_4, & (6.1.22) \\
 f_0 &= -2 \frac{2^{1/2}}{\pi^2} \beta^{-5/2} \left[\frac{2}{3} I_{3/2}(\eta_0) - \eta_0 I_{1/2}(\eta_0) \right], \\
 f_2 &= \frac{2^{1/2}}{24\pi^2} \beta^{-3/2} I_2(\eta_0) I'_{1/2}(\eta_0) (\nabla \eta_0)^2, \\
 f_4 &= \frac{2^{1/2}}{288\pi^2} \beta^{-1/2} \left\{ (I_2^2 - \frac{3}{5} I_3) (\Delta \eta_0)^2 + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{4} (I_3^2 - \frac{1}{5} I_5) (\nabla \eta_0)^4 + \right. \\
 &\quad \left. + (I_2 I_3 - \frac{2}{5} I_4) (\nabla \eta_0)^2 \Delta \eta_0 \right\} I'_{1/2}(\eta_0).
 \end{aligned}$$

С помощью данных выражений, а также уравнений (6.1.18) и (6.1.19) можно рассчитать термодинамические функции системы. После достаточно трудоемких вычислений получим, что уравнение

$$\frac{\delta \Omega[n(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})]}{\delta \eta_0(\mathbf{r})} = 0 \quad (6.1.23)$$

идентично уравнениям (6.1.16)–(6.1.17с).

При необходимости можно перейти от разложения в ряд по градиентам $\eta_0(\mathbf{r})$ к градиентному разложению по плотности $n(\mathbf{r})$, если принять во внимание соотношение между $\eta_0(\mathbf{r})$ и $n(\mathbf{r})$ согласно уравнению (6.1.17а). На основе соотношений

$$\begin{aligned}
 \nabla \eta_0 &= \frac{\pi^2 \beta^{3/2}}{2^{1/2}} \frac{\nabla n}{I'_{1/2}(\eta_0)}, \\
 \Delta \eta_0 &= -\frac{\pi^4 \beta^3}{2} (\nabla n)^2 \frac{I''_{1/2}(\eta_0)}{[I'_{1/2}(\eta_0)]^3} + \\
 &\quad + \frac{\pi^2 \beta^{3/2}}{2^{1/2}} \frac{\Delta n}{I'_{1/2}(\eta_0)},
 \end{aligned} \quad (6.1.24)$$

можно построить следующее выражение второго порядка по градиенту:

$$f_2[n(\mathbf{r})] = G[n(\mathbf{r})][\nabla n(\mathbf{r})]^2$$

$$G[n(\mathbf{r})] = \frac{\pi^2 \beta^{3/2} I_{1/2}''[\eta_0(\mathbf{r})]}{24 \cdot 2^{1/2} \{I_{1/2}[\eta_0(\mathbf{r})]\}^2}. \quad (6.1.25)$$

Первым вычислил значение функции f_0 и коэффициента $G(n)$ при $(\nabla n)^2$, фигурирующих в выражении для f_2 , Перрот (PERROT, 1979).

Для облегчения практических расчетов ограничим уравнение для свободной энергии невзаимодействующих электронов членом второго порядка по \hbar . В этом случае для расчета обменно-корреляционной составляющей свободной энергии удобно применить приближение локальной плотности электронов, которое включает в себя результаты по однородному электронному газу:

$$F_{xc} = F_x + F_c,$$

$$F_x = \int n(\mathbf{r}) \phi_x[n(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (6.1.26)$$

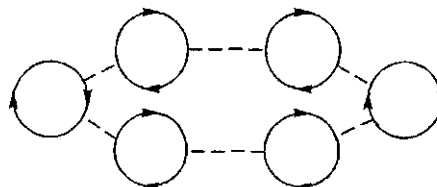
$$F_c = \int n(\mathbf{r}) \phi_c[n(\mathbf{r})] d\mathbf{r}.$$

Выражение для F_{xc} распадается на два уравнения. Значение F_x рассчитывается на основе приближения Хартри-Фока для случая однородного электронного газа, а значение F_c (согласно определению) — как разность между точным значением F_{xc} и значением F_x , полученным по методу Хартри-Фока. Величина $\phi_x[n]$ определяется диаграммой Фейнмана



$$(6.1.27)$$

а величина $\phi_c[n]$ — на основе приближения случайных фаз суммированием диаграмм типа



$$(6.1.28)$$

Данные диаграммы соответствуют обменным и корреляционным диаграммам для функций Грина (см. раздел 3.1). Вклад диаграмм (6.1.27)–(6.1.28) в

значение свободной энергии рассчитан на основе аппроксимаций Якоби-Паде для всех значений плотности и температуры (GRIMALDI et al., 1985; PERROT and DHARMA-WARDANA, 1984; EBELING and RICHERT, 1985a,b; KRAFFT et al., 1986; EBELING et al., 1988; EBELING and LEHMANN, 1989). Воско и др. (VOSKO et al., 1980) провели критический анализ задачи расчета обменно-корреляционной энергии однородного электронного газа, с учетом результатов, полученных Монте-Карло (SEPERLY and ADLER, 1980), и представили свои рекомендации для вычисления функции ϕ_c для нулевой температуры.

Рассмотрим варианты практического применения рассмотренной теории для расчета термодинамических свойств плотного вещества для частного случая термодинамического равновесия. В достаточно плотном веществе корреляции между тяжелыми частицами (ядра и ионы) настолько сильны, что становится возможным применение ячеечной модели для описания свойств вещества. Вещество рассматривается как среда, состоящая из отдельных электрически нейтральных ячеек, не взаимодействующих между собой, в центре которых расположено ядро. Для упрощения задачи считается, что ячейка имеет сферическую форму радиусом R_0 , величина которого определяется плотностью вещества ρ :

$$v_0 = \frac{4\pi R_0^3}{3} = \frac{M}{\rho}, \quad (6.1.29)$$

где M — масса ядра. Уравнение распределения по ячейке плотности электронов, находящихся в кулоновском поле ядра с зарядом Z , выводится на основе вариационного принципа

$$\frac{\delta \Omega_{int} \left[n(\mathbf{r}), \frac{Z}{r} \right]}{\delta n(\mathbf{r})} = 0 \quad (6.1.30)$$

и имеет следующую форму:

$$\mu[n(\mathbf{r})] - \frac{\partial G(n)}{\partial n} (\nabla n)^2 - 2G(n)\Delta n - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \mu.$$

Здесь $\mu(n)$ — химический потенциал однородного электронного газа, значение которого определяется производной от плотности свободной энергии

$$\mu[n] = \frac{\partial f(n, T)}{\partial n}.$$

Соответственно полученным в разделах 3.1 и 3.2 результатам, химический потенциал складывается из двух составляющих: идеальной и обменно-корреляционной:

$$\begin{aligned}\mu[n] &= \mu_{id}[n] + \mu_{xc}[n], \quad \mu_{id}[n] = \frac{\partial f_0[n]}{\partial n}, \\ \mu_{xc}[n] &= \frac{\partial f_{xc}(n)}{\partial n} = \mu_x[n] + \mu_c[n], \\ \mu_x[n] &= \frac{\partial(n\phi_x)}{\partial n}, \quad \mu_c[n] = \frac{\partial(n\phi_c)}{\partial n}.\end{aligned}\tag{6.1.31}$$

Аналитические выражения для $\mu_x(n)$ и $\mu_c(n)$ фигурируют в разных источниках (ПОЛИЩУК, 1986). По идее, можно воспользоваться выражениями, которые мы приводили в разделе 3.3, поскольку справедливо соотношение

$$f_{xc}(n) = f_e(n),$$

где $f_e(n)$ — вклад электронов в полную плотность свободной энергии. Более подробное описание обменно-корреляционных членов можно найти в книге Крефта и др. (KRAFFT et al., 1986). Интегро-дифференциальные уравнения (6.1.31) необходимо решать с учетом следующих граничных условий:

$$\begin{aligned}n(0) &< \infty, \\ \nabla n(R_0) &= 0, \\ \int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= Z.\end{aligned}\tag{6.1.32}$$

Первое условие предполагает получение конечного решения в нуле, второе — определяет непрерывность плотности $n(\mathbf{r})$ на границе ячейки, а также эквивалентность всех ячеек, а третье — представляет собой условие электронейтральности вещества. Калиткин и Кузьмина (КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1971) предложили численный метод решения системы уравнений (6.1.31)–(6.1.32) при нулевой температуре.

Плотность электронов, находящихся далеко от ядра на границе ячейки, $n(R_0)$ представляет собой плотность свободных электронов. Распределение связанных электронов $n_b(\mathbf{r})$ можно представить в виде

$$n_b(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - n(R_0),\tag{6.1.33}$$

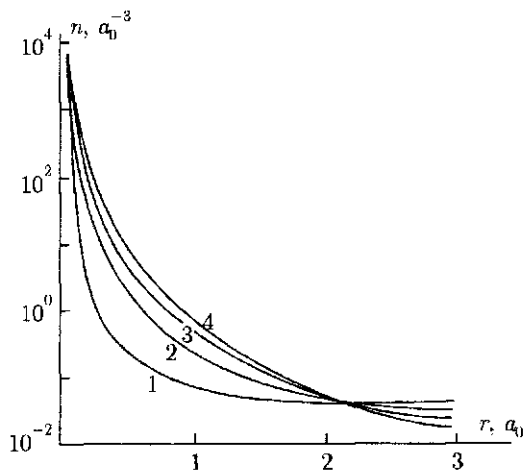


Рис. 6.1.1. Распределение плотности электронов в ячейке Вигнера-Зейтца для алюминия. Плотность равна $2,7 \text{ г см}^{-3}$. Температура: 1 — 1000 эВ; 2 — 100 эВ; 3 — 10 эВ; 4 — 0 эВ

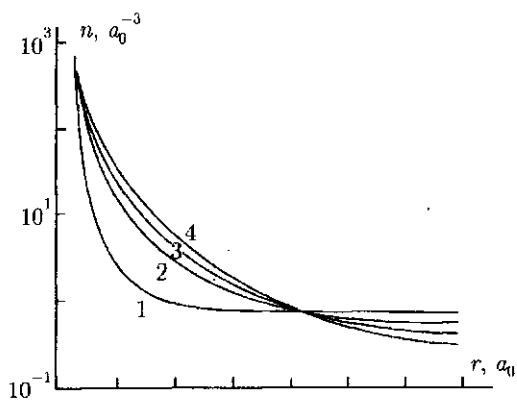


Рис. 6.1.2. Распределение плотности электронов в ячейке Вигнера-Зейтца для алюминия. Плотность равна 27 г см^{-3} . Температура: 1 — 1000 эВ; 2 — 100 эВ; 3 — 10 эВ; 4 — 0 эВ

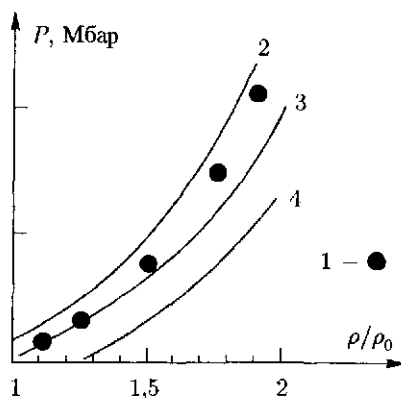


Рис. 6.1.3. Уравнение состояния алюминия при $T = 0$ К. 1 — экспериментальные данные (АЛЬТШУЛЕР и др., 1960а,б); 2 — модель Хартри-Фока-Слэтера (НОВИКОВ, 1985); 3 — теория функционала плотности в градиентном представлении (ПОЛИЦУК, 1986); 4 — модель Томаса-Ферми с учетом поправок (КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1971). ρ/ρ_0 — значение плотности относительно нормального значения

Теперь можно оценить радиус ионов

$$r_i = \frac{\int_{v_0}^{\infty} r n_b(r) dr}{\int_{v_0}^{\infty} n_b(r) dr}, \quad (6.1.34)$$

На рис. 6.1.1 изображена расчетная плотность электронов для алюминия с плотностью $\rho = 2,7 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. Графики построены при температурах от нуля до 10^3 эВ. На рис. 6.1.2 построены аналогичные графики для алюминия с плотностью $\rho = 27 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. В первом случае радиус R_0 ячейки Вигнера-Зейтца равен $3,02a_0$, а во втором случае — $1,40a_0$. Видно, что с повышением температуры происходит перераспределение электронов из внутренней области ячейки к ее границам, что соответствует, как правило, обычной термической ионизации. Сравнивая рисунки 6.1.1 и 6.1.2, видим, что описываемая модель учитывает также эффект ионизации давлением.

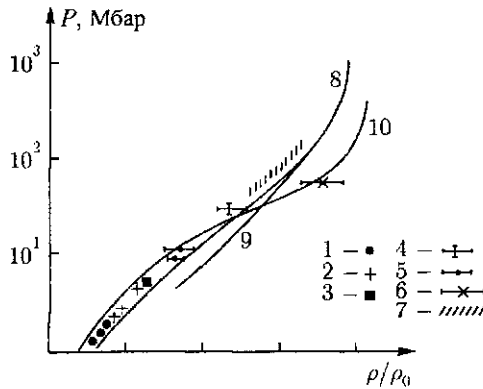


Рис. 6.1.4. Ударные адиабаты для алюминия.

Экспериментальные данные: 1 — АЛЬТШУЛЕР и др. (1960a,b); 2 — БУШМАН и др. (1984); 3 — KORMER et al. (1962); 4 — RAGAN (1984); 5 — СИМОНЕНКО и др. (1985); 6 — АВРОРИН и др. (1980); 7 — MODEL et al. (1985)

Расчетные данные: 8 — теория функционала плотности в градиентном представлении (ПОЛИЩУК, 1986); 9 — модель Томаса-Ферми с учетом поправок (КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1971); 10 — модель Хартри-Фока-Слэтера (НОВИКОВ, 1985).
 ρ/ρ_0 — значение плотности относительно нормального значения

В общем случае средний заряд иона можно найти из уравнения

$$Z_i = Z - \frac{4}{3}\pi R_0^3 n(R_0). \quad (6.1.35)$$

Если построить график распределения плотности электронов, можно получить больше информации о термодинамических свойствах системы, чем это необходимо для расчета ионизационного равновесия. Более подробно поговорим об этом в следующих разделах. Сейчас мы ограничимся рассмотрением примера расчета термодинамических параметров. Энтропию S и давление p можно вычислить путем дифференцирования термодинамического потенциала Ω :

$$S = - \left[\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right]_{\mu, V_0}, \quad p = - \left[\frac{\partial \Omega}{\partial V_0} \right]_{\mu, T}. \quad (6.1.36)$$

На рис. 6.1.3 показаны результаты практического применения описываемого подхода. Здесь экспериментальные и расчетные данные по сжимаемости

алюминия сравниваются для случая нулевой температуры. На рис. 6.1.4 изображены расчетные и экспериментальные ударные адиабаты алюминия. На сегодняшний день алюминий является наиболее исследованным в этом плане элементом.

6.2. Приближенные расчеты спектров электронов в модели ограниченного атома

Ячеечная модель вещества, рассмотренная нами в предыдущем разделе, по существу является квазиклассической моделью среднего атома. Она позволяет рассчитывать ионизационное равновесие в плотной нагретой плазме и функции распределения электронов, экранирующих центральное ядро. В отличие от квантово-механической модели ограниченного атома (см. раздел 5.2), в данной модели не учитывается наличие электронных оболочек.

Спектр электронов ограниченного атома зависит от температуры и плотности вещества и, следовательно, его нельзя рассчитать заблаговременно, в отличие от спектральных характеристик отдельных атомов и ионов. В этом отношении будет полезнее составить такую модель, которая бы не требовала повторного расчета мультиэлектронной системы на основе уравнений Шредингера.

Рассмотрим одну из разновидностей таких моделей, известную под названием «водородной модели с экранированием» (MORE, 1982). В разделе 4.5 мы уже говорили о ней. Представим себе атом, электроны которого движутся по различным квантовым орбитам в самосогласованном потенциальном поле:

$$U(r) = \frac{Z(r)}{r}, \quad (6.2.1)$$

где $Z(r)$ — экранированный заряд; r — расстояние от ядра. Ниже будем использовать атомные единицы. Сила, действующая на электрон в радиальном направлении, определяется дифференцированием уравнения (6.2.1):

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = \frac{Q(r)}{r^2}, \quad (6.2.2)$$

где $Q(r)$ — общий заряд ядра и экранирующих ядро электронов, локализованных внутри сферической области радиусом r . Заряды $Q(r)$ и $Z(r)$ связаны соотношением:

$$Q(r) = Z(r) - rZ'(r). \quad (6.2.3)$$

Для каждого n -го электронного состояния наиболее существенное значение имеет вблизи радиуса r_n , равного среднему радиусу электронной орбиты. Раскладывая $Z(r)$ по степеням $(r - r_n)$, получаем:

$$U(r) = \frac{Q_n}{r} + Z'_n + \frac{\delta Z_n(r)}{r}, \quad (6.2.4)$$

где параметры с индексом n рассчитываются при $r = r_n$, а в выражение для δZ_n входят члены высшего порядка по $(r - r_n)$. Пренебрегая его величиной, находим, что приближенный расчет спектра атома можно выполнить на основе формул для водорода, определяющихся величиной экранированного заряда:

$$E_n = E_n^0 - \frac{Q_n^2}{2n^2}, \quad (6.2.5)$$

где E_n — одноэлектронные энергетические уровни, $E_n^0 = -Z'_n$. В рассматриваемой нами модели не учитывается зависимость энергии от орбитального квантового числа l . В разделе 4.5 мы кратко обсуждали водородную модель с экранированием с расщеплением энергетических уровней по орбитальному моменту l . Члены уравнения (6.2.5) имеют следующий физический смысл: первый член представляет энергию взаимодействия электрона с ядром и внутренними электронами по отношению к его орбите, второй член представляет энергию взаимодействия электрона с внешними электронами. На этом основании приходим к универсальным приближенным выражениям:

$$Q_n = Z - \sum_{m < n} \sigma(n, m) P_m - \frac{1}{2} \sigma(n, n) P_n, \quad (6.2.6)$$

$$E_n^0 = \frac{1}{2} \frac{1}{r_n} \sigma(n, n) P_n + \sum_{m > n} \frac{P_m}{r_m} \sigma(m, n),$$

в которых параметры Q_n и E_n^0 выражаются через коэффициенты экранирования $\sigma(n, m)$ и числа заполнения P_n . Распределение электронов по орбиталям определяется главным квантовым числом n , которое может принимать целые значения от нуля до $2n^2$, и общим количеством электронов в атоме. Коэффициенты $\sigma(n, m)$ характеризуют степень экранирования ядра электроном, находящимся на уровне m , электрона, находящегося на уровне n . Общая энергия многоэлектронной системы равна:

$$E = \sum E_n P_n - U_{ee}, \quad (6.2.7)$$

где U_{ee} — энергия электрон-электронного взаимодействия. Ее значение необходимо вычесть из первого члена уравнения (6.2.7) по той причине, что в противном случае электрон-электронное взаимодействие будет учтено дважды. Мор (MORE, 1982) рассчитал значение U_{ee} на основе квазиклассических водородоподобных функций:

$$E = - \sum_n \frac{Q_n^2}{2n^2} P_n. \quad (6.2.8)$$

Полученный им результат удовлетворяет теореме Купмана (SLATER, 1974)

$$\frac{\partial E}{\partial P_n} = E_n. \quad (6.2.9)$$

Значения коэффициентов экранирования $\sigma(n, m)$ одинаковы для всех элементов периодической системы, впервые их получил Майер (MAYER, 1947) путем подгонки выражения для общей энергии (6.2.8) по значениям энергии связи и потенциалам ионизации атомов, рассчитанным на основе метода Хартри-Фока. Впоследствии Мор (MORE, 1982) еще раз вернулся к данной проблеме и предложил новые значения коэффициентов $\sigma(n, m)$, заметно усовершенствовав описание энергетических характеристик системы.

До сих пор мы рассматривали только случай изолированного атома. Теперь обобщим уравнения (6.2.8) и (6.2.6) для описания энергетических характеристик атомов, помещенных в среду. Рассматривая модель усредненного атома, можно допустить, что коэффициенты заполнения P_n имеют целочисленные значения, которые выведем воспользовавшись законами термодинамики (POMRANING, 1973; LOKKE and GRASBERGER, 1977; TSAKIRIS and EIDMAN, 1987).

Выражение для коэффициентов заполнения P_n можно вывести на основе системы уравнений (6.2.5) и (6.2.6), которые определяют спектр одноэлектронных энергетических уровней E_n в «усредненном» атоме, заполненных согласно статистике Ферми-Дирака:

$$P_n = \frac{2n^2}{\left[1 + \frac{317A}{\rho Z_i} T^{3/2} \exp\left(\frac{E_n}{T}\right) \right]}, \quad (6.2.10)$$

где A — атомный вес, ρ — плотность (в г см⁻³), Z_i — количество свободных электронов, приходящихся на атом, T — температура (в эВ). Система (6.2.10) замыкается условием электронейтральности

$$Z = Z_i + \sum_n P_n, \quad (6.2.11)$$

которое предполагает равенство заряда ядра и общего заряда свободных и связанных электронов, приходящихся на атом. На практике система уравнений (6.2.10) решается для ограниченного числа энергетических уровней, так что ее размерность оказывается конечной. Подобное допущение является справедливым в связи с тем, что в плотной материи практически отсутствуют электронные состояния высших уровней. Этот эффект носит название «ионизации давлением» (см. главы 4 и 5). Чтобы его учесть, можно ввести перед числами заполнения (уравнение (6.2.10)) множители, равные вероятностям заполнения уровня $d_n < 1$, которые зависят от плотности. В следующем разделе мы рассмотрим проблему, связанную с возникновением перехода диэлектрик-металл.

6.3. Модели, описывающие явление перехода диэлектрик-металл

Задача разделения электронов на связанные и свободные является первостепенной в физике плазмы. В главе 3, а также в издании (ЭБЕЛИНГ и др., 1979) это было детально объяснено. Особое значение данная задача приобретает при расчетах проводимости. Состояниями дискретного спектра являются такие, которые описываются электронной волновой функцией и могут быть нормированы. В произвольном слабом электрическом поле переход таких электронов в возбужденное состояние, отделенное запрещенной энергетической зоной, невозможен. То есть электроны не могут перемещаться в веществе и участвовать в переносе заряда. В непрерывном спектре состояния считаются свободными.

Задача разделения состояний электронов на свободные и связанные возникает также в термодинамике, где она связана с проблемой вычисления статистических сумм сложных частиц (связанных состояний), как было показано в главе 3. Высоковозбужденные (ридберговские) состояния, которые приводят к расходимости статистических сумм, вследствие взаимодействия частиц практически не реализуются в природе. В работах (АВЕ, 1959; ВЕДЕНОВ, ЛАРКИН, 1959; КРАСНИКОВ, 1967; EBELING, 1967, 1968, 1969) показано, что при расчете термодинамических функций необходимо учитывать эффекты экранирования кулоновского взаимодействия. В результате перераспределения вкладов свободных и связанных состояний в слабой идеальной плазме, вклад связанных состояний в статистическую сумму оказывается конечным. Математически это выражается в наличии множителя Бриллюэна–Планка–Ларкина при суммировании по связанным состояниям. Отметим, что обрезание статистических сумм за счет множителя

Бриллюэна–Планка–Ларкина не имеет физического смысла кроме как способ деления состояний на свободные и связанные.

Для изолированного атома границей разделения свободного и связанного состояний является нулевое значение энергии E_c . Предполагается, что энергия отсчитывается от величины, соответствующей состоянию полной ионизации, когда элементарные частицы бесконечно удалены друг от друга. Значение энергии в этой точке является нижней границей непрерывного спектра в идеальной плазме. Вследствие кулоновского взаимодействия между свободными частицами (энергии корреляции), граница непрерывного спектра сдвигается (см. разделы 3.5 и 4.6):

$$\Delta E_c \approx -\frac{Z_i}{R_s}, \quad (6.3.1)$$

где Z_i — средний заряд иона, R_s — дебаевский характерный радиус экранирования кулоновского взаимодействия. Напомним, что в данной главе мы пользуемся атомными единицами. В случае слабонеидеальной плазмы $R_s \simeq d$ (d — дебаевский радиус), а в случае сильно сжатой плазмы $R_s \simeq R_0$ (R_0 — радиус ячейки Вигнера-Зейтца). Энергия электрона E_n в атоме (ионе) примерно равна $-Z_i/r_n$ (r_n — среднее расстояние от ядра). Таким образом, состояние с числом n не существует как связанное при $E_n \simeq \Delta E_c$, т. е.

$$r_n \simeq R_s. \quad (6.3.2)$$

Мор (MORF, 1982) полагает, что для существования n -го связанного состояния в дебаевском потенциале в слабонеидеальной плазме (когда $d \gg R_0$) не достаточно выполнения условия $r_n \leq R_s$. Действительно, значение кинетической энергии электрона, находящегося на n -й удаленной орбите, имеет порядок $1/r_n$, поэтому длина l_n свободного пробега электрона по орбите n , определяемая столкновениями с окружающими частицами: $l_n \approx R_0^3/r_n^2$. При этом мы учли, что эффективное сечение кулоновского рассеяния обратно пропорционально квадрату кинетической энергии, а плотность частицы имеет порядок $1/R_0^3$. Таким образом, число столкновений электрона за один полный оборот равно $r_n/l_n \approx (r_n/R_0)^3$, так что связанное состояние n исчезает при условии $R_0 \ll r_n \ll d$.

Есть и другие физические факторы, влияющие на процесс разрушения связанных состояний. Известно, что в плазме существует микрополе, которое может сильно влиять на связанные состояния при высоких плотностях. Величину характерной энергии связанного электрона в микрополе можно оценить по влиянию ближайшего иона: $\Delta E \approx -Z_i/R_0$, что приводит к соответствующему уменьшению потенциального барьера. Учитывая,

что энергия связи электрона примерно равна Z_i/r_n , критерием разрушения связанного состояния будет служить условие:

$$r_n \simeq R_0. \quad (6.3.3)$$

Эффект экранирования ионов электронами также имеет значение для процесса ионизации. Действительно, допуская равномерность распределения свободных электронов с плотностью $\approx Z_i/R_0^3$, получаем, что согласно которому экранирующий заряд ΔZ электрона, расположенного на n -ой орбите, будет равен $Z_i(r_n/R_0)^3$. Условие ионизации сводится к условию полного экранирования $Z_i \approx \Delta Z$, что опять-таки соответствует критерию (6.3.3).

Рассмотрим критерий Инглиса-Теллера, который часто применяется при решении задач астрофизики. Согласно данному критерию, в случае, когда штарковский сдвиг энергетического уровня превышает расстояние до ближайшего возбужденного состояния, этот уровень служит границей непрерывного спектра. Расстояние ΔE_n между ближайшими водородоподобными уровнями составляет $Z_i/r_n^{3/2}$, в то время как Штарк-эффект линейен относительно напряженности электрического поля. Характерная напряженность микрополя плазмы равна Z_i/R_0^2 , тогда как характерный дипольный момент атома равен r_n . То есть, условие слияния n -ого уровня с непрерывным спектром можно записать в виде $E_n \approx r_n Z_i / R_0^2$ (INGLIS and TELLER, 1939). Получаем:

$$r_n \simeq R_0^{4/5}. \quad (6.3.4)$$

Данное выражение отличается от условия (6.3.3) значением степени.

Примечателен тот факт, что условие (6.3.3) (или (6.3.4)) справедливо как для основного, так и возбужденных состояний атома (иона). Следовательно, условие (6.3.3) можно применять для расчета плотности вещества при переходе диэлектрик-металл, за которым следует «ионизация давлением» более глубоких энергетических уровней. В выражениях (6.3.2)–(6.3.4) опущены численные коэффициенты перед выражениями, поскольку полученные оценки слишком грубы, чтобы привести к их конкретным величинам. Будем считать, что данные коэффициенты являются подмножечными параметрами, значения которых универсальны для всех энергетических уровней атома (или иона). Значения коэффициентов можно подобрать путем сравнения с экспериментальными данными по ионизации давлением для конкретного энергетического уровня электрона в атоме определенного вещества.

Опираясь на данный подход, для каждого члена суммы в уравнении (6.2.10) были введены следующие весовые коэффициенты (TSAKARIS

and EIDMAN, 1987):

$$d_n = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha r_n}{R_0}\right)^\beta},$$

Значения $\alpha = 3$ и $\beta = 4$ были получены подгонкой результатов расчета ионизационного равновесия в модели Томаса–Ферми.

В этой связи упомянем также подход развитый в работе (MHALAS et al., 1988).

Вернемся к условию (6.3.3), полученному в рамках «плазменного подхода». Оно почти соответствует приближенному критерию перехода от диэлектрик–металл в перколяционных системах. Рассмотрим систему проводящих сфер радиусом r_0 , беспорядочно распределенных в пространстве при отсутствии корреляций. Такая система начнет проводить электрический ток при плотности, соответствующей условию (ШКЛОВСКИЙ, ЭФРОС, 1979):

$$r_0 \cong 0,7R_0, \quad (6.3.5)$$

где R_0 — радиус сферического объема, приходящегося на одну сферу.

Ликальтер (ЛИКАЛЬТЕР, 1984) предложил рассматривать атомы как проводящие сферы радиусом r_0 , а с помощью перколяционного условия (6.3.5) оценивать положение точки перехода диэлектрик–металл в парах металлов. В водородоподобном приближении средний радиус орбиты валентного электрона в атоме равен $r_0 = 1/2I$ (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1989). Отметим, что Ликальтер (ЛИКАЛЬТЕР, 1984) использовал для r_0 в два раза большее значение, при этом он адекватно описал экспериментальные данные (SCHONHERR et al., 1979), полученные при исследовании перехода диэлектрик–металл в парах ртути. Таким образом, перколяционное условие (6.3.5) практически совпадает с критерием (6.3.3) для плазмы, а неопределенный коэффициент порядка нескольких единиц можно рассматривать, как подгоночный параметр.

Перколяционная модель тесно связана с вопросом топологической неупорядоченности при переходе диэлектрик–металл. Данная модель основана на концепциях классической механики. При достаточно больших плотностях проводящие сферы образуют бесконечные кластеры, так что изначально локализованные внутри сферы электроны делокализуются, т. е. теперь они могут преодолевать значительные расстояния и участвовать в процессе переноса заряда. В квантовой механике эффект неупорядоченной локализации (делокализации) электронных состояний впервые был рассмотрен Андерсоном (ANDERSON, 1958).

Представим себе решетку потенциальных ям, в каждой из которых есть связанное состояние с энергией $-\alpha^2/2$. Если расстояние между центрами сил превышает характерный масштаб электронной орбиты $1/\alpha$, можно использовать приближение сильной связи. Спектр электронных состояний представляет собой энергетическую зону, ширина которой в водородоподобном приближении равна

$$V(R) = 2z\alpha \left[\frac{3}{2}(1 + \alpha R) + \frac{1}{6}(\alpha R)^2 \right], \quad (6.3.6)$$

где R — расстояние между ближайшими соседями, z — количество центров в первой координационной сфере. Андерсон (ANDERSON, 1958) так описал неупорядоченность рассматриваемой системы: функция $V(R)$, определяющая вероятность перехода электрона между центрами, остается постоянной, а к значению энергии связи $-\alpha^2/2$ добавляется случайная величина, равномерно распределенная в интервале $(-U, U)$.

Возникает вопрос: какова вероятность нахождения электрона на расстоянии r от центра по истечении длительного периода времени, если в начальный момент времени электрон находился в данном центре? В том случае, когда вероятность экспоненциально уменьшается с увеличением расстояния, диффузии не происходит, а электрон остается локализованным. Для случая, когда $z = 6$, Андерсон доказал, что состояния будут локализованы при условии $U/V > 5,5$.

Исследование систем с топологической неупорядоченностью представляет особый интерес для решения практических задач из области физики плазмы. Газы и жидкости не имеют кристаллической структуры, так что расстояние между центрами сил является случайной величиной. Подобную модель разупорядоченной системы впервые исследовал Лифшиц (ЛИФШИЦ, 1964). Опираясь на идеи Андерсона, Мотт (МОТТ, 1977) предложил оценку критерия локализации в модели Лифшица.

Рассмотрим систему из двух центров сил, расположенных друг от друга на расстоянии R . Локализованный вблизи них электрон может находиться как в четном, так и нечетном состоянии. Если значение энергии отсчитывать от уровня, соответствующего бесконечно удаленным друг от друга центрам, ее величина будет определяться согласно уравнению (6.3.6) интегралом перекрытия, $E(R) = \pm I_0 \exp(-\alpha R)$. В последнем выражении явно выделена наиболее сильная экспоненциальная зависимость. Поскольку параметр R — это случайная величина с характерным значением $R_0 = (3/4\pi n)^{1/3}$, зависящим от плотности числа центров n , Мотт (МОТТ, 1977) предложил оценивать величину U в модели Андерсона по

значению $E(R_0)$. Среднее расстояние между двумя центрами равно $R_2 = (2/n)^{1/3}$, а ширина энергетической зоны (согласно Мотту) определяется выражением $2zE(R_2)$. С учетом критерия Андерсона для случая $U = 2V$ и $z = 6$ Мотт свел критерий локализации к виду:

$$\alpha R_0 \simeq 3, \quad (6.3.7)$$

где R_0 — радиус сферы (ячейки Вигнера–Зейтца) приходящейся на один центр. Дебни (DEBNEY, 1977) получил в два раза меньшее значение для правой части условия (6.3.7). Принимая во внимание, что энергия связи и параметр α связаны соотношением $I = \alpha^2/2$, приходим к выводу, что зависимость локализации от энергии связи на основе уравнений (6.3.7) и (6.3.3) различна.

До сих пор мы рассматривали поведение одного электрона в поле беспорядочно распределенных центров. Применение модели оправдано в тех случаях, когда можно пренебречь электрон-электронным взаимодействием, или когда влияние других электронов можно рассматривать при помощи дополнительного эффективного потенциала. Критерий применимости одноэлектронного приближения строится следующим образом. Энергия кулоновского взаимодействия двух электронов с разными проекциями спинов, локализованных на одном и том же силовом центре, равна (согласно водородоподобному приближению) $U_0 = 5\alpha/8$. Данная величина является оценкой разности между потенциалом ионизации атома и электронным средством к этому атому. Сравним значение U_0 с соответствующим значением для энергетической зоны шириной V , значение которой определяется уравнением (6.3.6). При $U_0 \ll V$ одноэлектронное приближение является справедливым и может быть применено для реальных металлов. Волновые функции электронов описывают блоховские волны и распространены по всей кристаллической решетке. С уменьшением плотности энергетическая зона сужается, $V \ll U_0$, начинают доминировать электрон-электронные корреляции. Если единственный валентный электрон соответствует каждому силовому центру, основным состоянием системы будет являться такое состояние, в котором каждый электрон локализован вблизи своего собственного центра. В этом случае перенос заряда невозможен, так как для перехода электрона от занятого до соседнего центра необходимо затратить энергию $\approx U_0$. Переход из одного режима в другой осуществляется при условии $U_0 \approx V$. Это значит, что сжатие кристаллической решетки ведет к изменению электронного спектра и делокализации состояний. Этот вид перехода диэлектрик-металл, имеющий место даже в случае кристаллической упорядоченности и связанный с электрон-электронным взаимодействием, носит название перехода Мотта.

Модель Хаббарда (HUBBARD, 1964) более формально описывает поставленную задачу. Суть в следующем: когда центры сближаются, энергетический уровень $-\alpha^2/2$ расщепляется в энергетическую зону, ширина которой имеет порядок V . Все состояния в данной энергетической зоне являются заполненными, поскольку вследствие кулоновского отталкивания на одном центре в основном состоянии может находиться не более одного электрона. Данная зона названа зоной Хаббарда. Очевидно, что из-за наличия на одном центре двух электронов энергетический уровень $-\alpha^2/2 + U_0$, соответствующий двум электронам на одном центре, расщепляется в энергетическую зону шириной порядка V . Эта, так называемая, верхняя зона Хаббарда, никем не занята. Следовательно, можно говорить о существовании двух энергетических зон, разделенных щелью $(U_0 - V)$, из которых нижняя полностью заполнена, а верхняя — пуста. При нулевой температуре вещество является диэлектриком в том случае, если $U_0 - V \geq 0$. Металлизация происходит при условии

$$U_0 \simeq V, \quad (6.3.8)$$

когда сливаются обе зоны. Решение уравнения (6.3.8) для случая шести ближайших соседей ($z = 6$) соответствует оценке (6.3.7).

Итак, имеется два разных условия делокализации связанного состояния с энергией связи, равной $I - \alpha^2/2$. Первое из них определяется уравнением (6.3.3), второе — уравнением (6.3.7). Если выразить данные условия через плотность вещества ρ , получим следующие соотношения:

$$\rho_1 = C_1 A I^3, \quad (6.3.9)$$

$$\rho_2 = C_2 A I^{3/2}, \quad (6.3.10)$$

где A — атомный вес, C_1 и C_2 — соответствующие численные коэффициенты, выступающие в роли подгоночных параметров.

При температуре $T = 2100$ К переход диэлектрик-металл в плотных парах цезия начинается при плотности $\rho \approx 0,45$ г см⁻³ (HENSEL, 1976). При этом электропроводность примерно равна 200 Ом⁻¹ см⁻¹, что соответствует минимальной металлической проводимости по оценке Мотта (МОТТ, 1974). Основываясь на данных результатах, можно определить значения коэффициентов C_1 и C_2 , которые оказываются равными $6,0 \cdot 10^{-5}$ и $4,6 \cdot 10^{-4}$, соответственно (плотность измеряется в г/см³, потенциал ионизации — в эВ). Выражения для радиусов ячейки Вигнера-Зейтца (6.3.9) и (6.3.10) будут иметь вид:

$$R_1 = \frac{1,3}{I}, \quad (6.3.11)$$

$$R_2 = \frac{3,42}{\sqrt{I}}. \quad (6.3.12)$$

Заметим, что уравнение (6.3.12) аналогично уравнению (6.3.7).

Оценка (6.3.11) предполагает, что при нормальных условиях во всех металлах на каждый атом приходится по одному свободному электрону, а переход диэлектрик-металл происходит при значениях плотности, которые ниже нормальной. Исключением служит ртуть, переход диэлектрик-металл в которой происходит при близких к нормальному значению плотностях согласно оценке (6.3.11). По этой же оценке некоторые металлы (например, свинец, золото, висмут, германий и др.) являются диэлектриками в критической точке.

Оценка (6.3.12) дает приемлемое количество свободных электронов, приходящихся на один атом, в металле при нормальных условиях, причем это количество близко по значению к валентности элементов. Согласно данной оценке все металлы в критической точке являются проводниками. Следовательно, ртуть в которой переход диэлектрик-металл происходит при плотности $8 - 9 \text{ г см}^3$ (SHCÖNHERR et al., 1979), является исключением и к ней неприменимы оценки (6.3.11) и (6.3.12).

На самом деле, довольно трудно сделать выбор между оценками (6.3.11) и (6.3.12). С точки зрения широкодиапазонной модели, которая должна описывать состояния вплоть до плотности твердого тела или выше, видимо предпочтительнее оценка (6.3.12).

6.4. Обобщенная химическая модель

Для детального расчета ионизационного равновесия слабонеидеальной плазмы, как правило, решают систему уравнений Саха при условии электронейтральности (см. раздел 4.1 и главу 5):

$$\frac{n_{i+1}n_e}{n_i} = f_i \exp\left(-\frac{I_i}{T}\right), \quad (6.4.1)$$

$$\sum_i i n_i = n_e,$$

где n_i — плотность ионов с зарядовыми числами $i \geq 0$, n_e — плотность свободных электронов. Правая часть уравнения (6.4.1) является константой равновесия, значение которой зависит от плотности компонентов и температуры T . Экспоненциальный множитель определяет зависимость от температуры. I_i — потенциал ионизации иона с зарядом i . При расчете предэкспоненциальных множителей f_i можно воспользоваться разными мето-

дами ограничения статсумм компонентов, а также разными поправками на взаимодействие частиц и вырождение электронов (EBELING et al., 1976a, 1979; ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1984; ГРЯЗНОВ и др., 1980b; ZELENER et al., 1981). Причем, полученные на основе разных методов результаты расчета плотностей частиц будут отличаться некритично по сравнению с точностью вычисления электронных коэффициентов переноса. Приемлемая точность достигается даже в случае ограничения статсумм только основными состояниями компонентов. Более важное значение имеет описание кулоновской неидеальности. С практической точки зрения, удобным подходом является тот, который был разработан на основе кольцевого приближения в большом каноническом ансамбле. В области слабой неидеальности $\Gamma \ll 1$ (Γ — параметр неидеальности, равный отношению характерных значений потенциальной и кинетической энергии частицы), это приближение соответствует дебаевскому, тогда как при $\Gamma \gg 1$ эти два подхода приводят к разным результатам: значения поправок по абсолютному значению в кольцевом приближении в большом каноническом ансамбле оказываются меньше. В целом, данное приближение не противоречит результатам подхода, рассмотренного в разделе 3.2 (см. также ГРЯЗНОВ и др., 1980b и главу 5). Тем не менее, данные поправки не описывают рост степени ионизации при постоянной температуре по мере повышения плотностей, т. е. явление «ионизации давлением». В разделе 6.3 мы уже говорили о некоторых физических аспектах, влияющих на ионизацию давлением. Проблема состоит в адекватном описании двух явлений: термической ионизации и ионизации давлением — в рамках универсальной модели. Одним из направлений решения данной задачи является подход, изложенный в главе 4, где обсуждается вариант химической модели, основанный на едином выражении для свободной энергии, и где учитываются эффекты, ответственные за оба типа ионизации (см. главу 4).

Альтернативный метод решения поставленной задачи состоит в применении модифицированной полуэмпирической модели среднего иона (см. раздел 6.2). Число заполнения P_n данной подоболочки необходимо умножить на коэффициент d_n , характеризующий вероятность существования данной подоболочки: $P_n \Rightarrow P_n d_n$. Зависимость d_n от плотности вещества ρ можно выразить соотношением (ZIMMERMANN and MORE, 1980; TSAKIRIS and EIDMAN, 1987):

$$d = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha R_n}{R_0}\right)^\beta}, \quad (6.4.2)$$

где $R_n = n^2/\Omega_n$ — эффективный радиус оболочки n , R_0 — радиус ячей-

ки Вигнера-Зейтца; значения параметров $\alpha = 3$ и $\beta = 4$ соответствуют расчетам ионизационного равновесия по методу Томаса-Ферми в широком диапазоне температур и плотностей. К сожалению, до сих пор не ясно, как точно в рамках данного подхода можно описать ионизационное состояние при плотностях, соответствующих твердому телу. В любом случае, сама по себе модель Томаса-Ферми недостаточно хорошо учитывает оболочечные эффекты, которые приобретают особое значение при решении задач классификации металлов и неметаллов.

Существует другой подход (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988), основанный на модификации уравнения (6.4.1) и учитывающий оценку (6.3.12) плотности, при которой происходит делокализация электронного состояния. Электроны с энергией связи I начинают делокализоваться тогда, когда радиус ячейки Вигнера-Зейтца оказывается равным характерному размеру электронной оболочки $a(I)$ (см. раздел 6.2).

Чтобы правильно описать процесс перехода от диэлектрика к металлу, необходимо учесть два факта. Экспериментальные исследования плазмы цезия, калия и ртути (HENSEL, 1976) показали, что переход между диэлектриком и проводящими фазами происходит непрерывно в определенном диапазоне плотностей. В этой связи стоит ввести понятие ширины перехода $\Delta(I)$ по отношению к среднему межчастичному расстоянию. Физический смысл ширины перехода заключается в том, что она должна быть связана с характерным размером валентной электронной оболочки атома или иона. Из этих соображений стоит ожидать с увеличением потенциала ионизации I уменьшения величины $\Delta(I)$. Действительно, результаты экспериментального исследования цезия, калия и ртути указывают на то, что при температурах, близких к экспериментальным, переход в щелочных металлах более размыт. Следовательно, на основе анализа размерностей приходим к простой зависимости:

$$\Delta(I) = \delta a(I),$$

где δ — независимый от ионизационного потенциала параметр. Далее размеры электронной оболочки атома (или иона) должны увеличиваться с ростом температуры вследствие перехода внешних электронов на более высокие энергетические уровни. Таким образом, переход металл-диэлектрик при высоких температурах необходимо сдвинуть в сторону более низких плотностей. Полищук и Фортон (ПОЛИЩУК, ФОРТОН, 1990) предложили свою модель расчета ионизационного равновесия, в которой учитываются все вышеперечисленные эффекты, свойственные переходу диэлектрик-металл. Данная модель позволяет описать процессы термической ионизации и ионизации давлением. В этом случае форма уравнений Саха (6.4.1)

может остаться без изменений. Явление делокализации электронных состояний можно математически выразить через снижение потенциала ионизации:

$$\frac{n_{i+1}n_e}{n_i} = f_i \exp\left(-\frac{I_i}{T} + \frac{\Delta I_i(\rho)}{T}\right). \quad (6.4.3)$$

Функция, описывающая эффективное снижение потенциала ионизации $\Delta I_i(\delta)$, имеет вид:

$$\Delta I_i(\rho) = I_i \ln \tilde{\theta} \left(\frac{R - a(I)}{\Delta(I)} \right), \quad (6.4.4)$$

$$\tilde{\theta}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-2x)}.$$

Нетрудно видеть, что при $R \gg a(I)$ справедливо неравенство $\Delta I_i(\delta) \ll I_i$, а уравнения (6.4.3) и (6.4.1) совпадают. В области перехода (когда $|R - a(I)| \approx \Delta(I)$) имеем $\Delta I_i \approx I_i$, что позволяет описать делокализацию электронных состояний. Из уравнения (6.4.3) следует, что можно также описать эффект снижения плотности, соответствующий переходу, с ростом температуры.

В разделе 6.3 мы говорили, что для более корректного описания состояния ионизации металлов в твердом состоянии предпочтительнее выбрать следующую зависимость $a(I)$ от I :

$$a(I) = \frac{\alpha}{\sqrt{I}}, \quad (6.4.5)$$

где α — определяемая из экспериментальных данных константа (аналогично δ). Из сравнения с экспериментом по измерению электропроводности в области перехода диэлектрик-металл вблизи критической точки (HENSEL, 1976, 1987) были получены следующие результаты для плазмы щелочных металлов: $\alpha = 4,4$ и $\delta = 0,44$. При $(R - a)/\Delta < 0$ в уравнении (6.4.4) доминирует экспоненциальная составляющая, поэтому приходим к соотношению:

$$\Delta I \simeq I_i \frac{2[a(I_i) - R]}{\Delta(I_i)}. \quad (6.4.6)$$

Делокализация электронного состояния происходит при условии $\Delta I_i \simeq I_i$. С учетом значений параметров α и δ , полученных из уравнения (6.4.6), данная оценка совпадает с полученной ранее оценкой (6.3.12).

На рис. 6.4.1 представлена электропроводность цезия, рассчитанная с использованием уравнений (6.4.3)–(6.4.5) (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988; ПОЛИЩУК, ФОРТОВ, 1990), в сравнении с экспериментальными данными (HENSEL, 1976). Из рисунка видно, что существует достаточно хорошее соответствие между экспериментальными и расчетными данными.

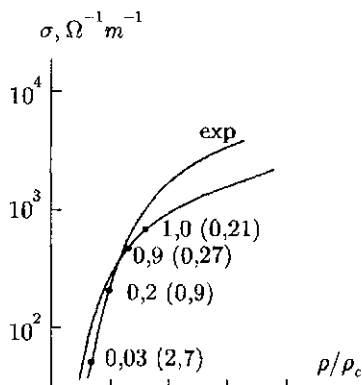


Рис. 6.4.1. Зависимость электропроводности цезия (Cs) вблизи критической точки при $T = 1,025T_c$ от отношения ρ/ρ_c (индекс c относится к параметрам в критической точке). Экспериментальные данные получены Хенселем (HENSEL, 1976), расчетные данные — Беспаловым и Полищуком (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988). Цифрами обозначена степень ионизации. В скобках приведены значения параметра вырождения T/E_F

На рис. 6.4.2 и 6.4.3 представлена зависимость степени ионизации (среднего заряда тяжелых частиц) алюминия и золота от плотности и температуры в широком диапазоне параметров. Расслоение плазмы на фазы не учитывается, а в области фазового перехода строится усредненная картина, которая описывается условно однородным веществом. Уравнение (6.4.4) для расчета снижения потенциала ионизации удовлетворительно описывает эффект делокализации ионов в основном состоянии. Несмотря на простоту подхода, уравнение (6.4.4) позволяет учесть такой тонкий эффект, как просветление плазмы в определенном диапазоне частот при повышении плотности (ПОЛИЩУК, ФОРТОВ, 1990).

При гидродинамическом моделировании необходимо решать сложную систему связанных нелинейных уравнений. Численный расчет степени

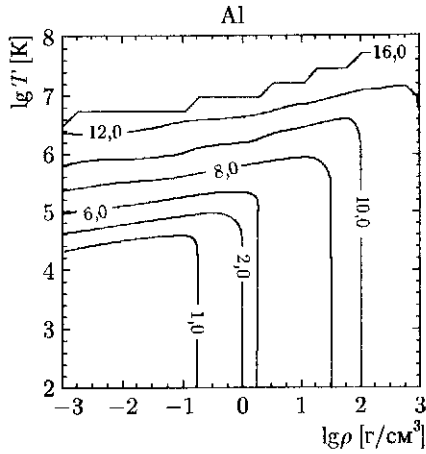


Рис. 6.4.2. Изолинии среднего заряда тяжелых частиц в алюминиевой плазме на диаграмме температура-плотность

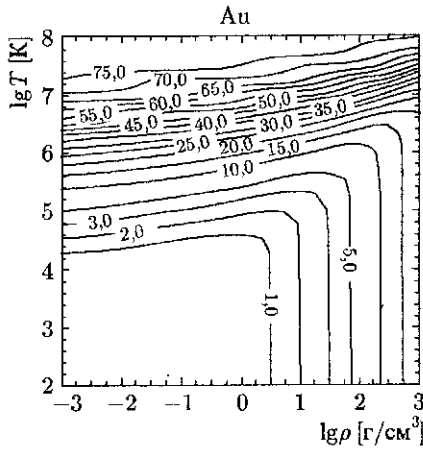


Рис. 6.4.3. Изолинии среднего заряда тяжелых частиц в плазме золота на диаграмме температура-плотность

ионизации на каждом шаге занимает много времени, даже при использовании простейших моделей (РАЙЗЕР, 1959; БАСКО, 1985). Не всегда возможно (или удобно) и использование табличных данных по составу плазмы. В этом случае наиболее предпочтительным является аналитический метод расчета ионного состава. Беспалов и Полищук (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1989) вывели аналитические формулы для расчета степени ионизации, применимые в широком диапазоне плотностей и температур. Конкретный химический элемент в данной формуле характеризуется только набором потенциалов ионизации и атомным весом. Более того, в нее включены восемь подгоночных параметров. Главная особенность данной формулы — ее универсальность, т. е. для всех элементов периодической системы используются одинаковые значения параметров.

Отметим, что формула Беспалова и Полищука (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1989) не является просто численной аппроксимацией. В ней явно учитываются физические особенности термической ионизации и ионизации давлением. В ее основе лежит использование сглаженной $\tilde{\theta}$ -функции, о которой мы говорили в предыдущем разделе:

$$\tilde{\theta}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-2x)}. \quad (6.4.7)$$

Для удобства введем логарифмические переменные $\bar{\rho} = \lg \rho$ и $t = \lg T$ (плотность измеряется в $\text{г}/\text{см}^3$, температура — в эВ).

Рассмотрим сначала термическую ионизацию. Принимая во внимание характер зависимостей, представленных на рисунках 6.4.2 и 6.4.3, предположим, что для каждого иона с зарядом k и потенциалом ионизации I_k существует характеристическая температура ионизации $t_k(\bar{\rho})$, зависящая от плотности. Запишем данную зависимость в простой форме:

$$t_k(\bar{\rho}) = t_k + \gamma(\bar{\rho} - \bar{\rho}_0). \quad (6.4.8)$$

Первое слагаемое данного уравнения равно:

$$t_k = \theta I_k, \quad (6.4.9)$$

что соответствует росту характеристической температуры по мере увеличения потенциала ионизации. Второе слагаемое уравнения (6.4.8) характеризует затухание термической ионизации при увеличении плотности (принцип Ле Шателье–Брауна). В приведенной формуле фигурируют три подгоночных параметра: θ , γ и $\bar{\rho}_0$. Заряд иона определяется температурной

ионизацией. Возьмем функцию, описывающую заряд иона, представленный в следующей форме:

$$Z_T(\rho, T) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} \tilde{\theta}(x_k), \quad (6.4.10)$$

$$x_k = \frac{t - t_k(\bar{\rho})}{\alpha t_k(\rho)},$$

где α — подгоночный параметр, от значения которого зависит ширина термического перехода. Суммирование производится для всех возможных ионов.

Теперь рассмотрим ионизацию давлением. Аналогично термической ионизации, предположим, что для каждого иона с зарядом k существует характеристическая плотность, при которой происходит делокализация валентного электрона:

$$\bar{\rho}_k = \rho_k^0 - \varepsilon(t - \tau), \quad (6.4.11)$$

первый член данного уравнения равен (см. раздел 6.3):

$$\bar{\rho}_k^0 = \lg(AD I_k^{3/2}). \quad (6.4.12)$$

Здесь A — атомный вес, I_k — потенциал ионизации (в эВ), а значение $D = 4,6 \cdot 10^{-4}$ определено в соответствии с (6.3.10). Второй член уравнения (6.4.11) является поправкой к значению температуры, он описывает характерное искривление изолиний заряда (рис. 6.4.2 и 6.4.3) в области перехода, где преобладает ионизация давлением. Аналогичным образом определим функцию, определяющую средний заряд иона, обусловленный ионизацией давлением:

$$Z_\rho(\rho, T) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} \tilde{\theta}(y_k), \quad (6.4.13)$$

$$y_k = \frac{\bar{\rho} - \bar{\rho}_k}{\beta t},$$

где значение подгоночного параметра β определяет ширину перехода.

Результирующая формула описывает оба вида ионизации:

$$Z(\rho, T) = \max \{Z_T, Z_\rho\}. \quad (6.4.14)$$

Беспаловым и Полищуком с помощью формул (6.4.10) и (6.4.13) были обработаны большие массивы расчетных значений $Z(\rho, T)$, полученных численно при помощи обобщенной химической модели плазмы таких металлов,

как Al, Pb, Cu, Fe, Cs, Hg, и таких неметаллов, как Ar, Xe, Ne. В результате были получены следующие значения универсальных параметров:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0,05, & \beta &= 0,05, \\ \gamma &= 0,125, & \bar{\rho}_0 &= -4, \\ \theta &= 0,1, & \tau &= 2, \\ \varepsilon &= 0,075. \end{aligned} \tag{6.4.15}$$

При степенях ионизации с $Z - i \geq 0,1$ погрешность аппроксимации составляет 20–30%.

Следуя данной методике, был рассчитан средний заряд тяжелых частиц для плотной плазмы различных элементов в широком диапазоне температур и плотностей. Результаты сведены в таблицы термодинамических свойств, представленных в главе 10. Фёрстер и др. (FÖRSTER et al., 1991c) провели независимый сравнительный анализ результатов, полученных на основе данного подхода, с результатами других расчетных методов, о которых говорилось в разделе 4.5.

Данные по ионному составу, рассчитанные в обширной области плотностей и температур, необходимы для дальнейшего аналитического вычисления теплофизических свойств системы: электро- и теплопроводности, тормозной способности и оптических свойств вещества. Об этом речь пойдет в следующем разделе.

6.5. Полуэмпирический расчет электронных коэффициентов переноса

В данном разделе мы кратко познакомимся с теоретическими разработками, посвященными расчету тепло- и электропроводности плазмы в широком диапазоне плотностей и температур. Затем мы более подробно рассмотрим расчетные методы, на основе которых были получены табличные данные, содержащиеся в главе 10.

Впервые полуэмпирический метод расчета электронных коэффициентов переноса в плотной горячей плазме разработали Ли и Мор (LFE and MORE, 1984). Они предложили рассчитывать ионизационное равновесие на основе принципов, так называемой, «водородной модели с экранированием» (LOKKE and GRASBERGER, 1977), о которой мы говорили в разделах 4.5 и 6.2.

Транспортные коэффициенты в газовой фазе были рассчитаны на основе уравнения Больцмана в τ -приближении. В этой области расчет кулоновских столкновений осуществляется общепринятым методом Бриска

и др. (BRYSK et al., 1975). Для веществ в жидком и твердом состоянии применяется модель Займана (ZIMAN, 1969) со структурным фактором, вычисляемым на основе длинноволнового приближения. В рамках этой модели сжимаемость связана с температурой плавления согласно критерию Линдемана, а эффективное сечение определяется в борновском приближении для дебаевского потенциала. Для описания скачка удельной электропроводности при плавлении, использовались экспериментальные данные. Зависимость температуры плавления от плотности оценивалась по данным Гранфила и Мора (GRANFILL and MORE, 1978). Свою модель Ли и Мор (LEE and MORE, 1984) построили на базе нескольких моделей и дополнительных предположений. Минимальное значение кулоновского логарифма бралось равным 2 (согласно численным результатам, Ли (LEE, 1977)), а длина свободного пробега электрона l ограничена снизу межионным расстоянием r_0 . Удовлетворительное описание эксперимента (NG et al., 1986) достигается при $l > 2r_0$. Модель Ли и Мора (LEE and MORE, 1984) не противоречит результатам теоретического подхода Роджерса и др. (ROGERS et al., 1981), а также Уильямса и Де Витта (WILLIAMS and DE WITT, 1969). С точностью до фактора 2 эти результаты соответствуют экспериментальным данным, полученным Ивановым и др. (ИВАНОВ и др., 1976).

Ринкер в серии работ (RINKER, 1985a-c, 1988) рассмотрел проблему построения широкодиапазонной модели расчета тепло- и электропроводности плазмы. В простейшей модели (RINKER, 1985a) ионизационное равновесие рассчитывалось на основе модели Томаса-Ферми (см. раздел 6.1). Потенциал Томаса-Ферми был аппроксимирован формулой дебаевского типа, а эффективное сечение вычислялось с помощью борновского приближения. Межионные корреляции были учтены в рамках модели Дебая-Хюккеля. В своих последующих работах Ринкер (RINKER, 1985b,c, 1988) представил более сложную модель, в которой ионизационное равновесие вычислялось в результате решения уравнений Дирака в ячеечной модели. Взаимодействие электронов с экранированным ионом описывалось потенциалом, являющимся линейной комбинацией потенциала Томаса-Ферми-Дирака (ТФД) и потенциала Дирака-Фока-Слэтера (ДФС) для изолированного иона. Значения весовых коэффициентов были взяты с таким учетом, чтобы при $T \gg 100$ эВ и $\rho \gg 100$ г/см⁻³ величина потенциала совпадала со значением потенциала ТФД, в противном случае — со значением потенциала ДФС. При этом числа заполнения выбирались так, чтобы либо количество электронов в зоне проводимости было близко к реальному значению или описывалась проводимость жидкой фазы с неопределенностью в пределах 100% в точке плавления. Дифференциальное сечение рассеяния определялось методом парциальных волн. Были

проанализированы различные методы учета межсионных корреляций: модель Дебая-Хюккеля, приближение Перкуса-Йевики для твердых сфер, а также их комбинации. В итоге им (RINKER, 1988) было принято решение использовать табличные данные для структурного фактора однокомпонентной плазмы (ROGERS et al., 1983). Электропроводность рассчитывалась по формуле Займана, а для вычисления теплопроводности использовалось решение уравнения Ленарда-Балеску (BALESCU, 1963), полученное Лампэ (LAMPE, 1968a,b) методом Чепмена-Энскога для случая частично вырожденной плазмы со слабым межчастичным взаимодействием. Значение кулоновского логарифма, определяющего сечение электрон-ионного рассеяния, было взято из расчетов электропроводности. Кулоновский логарифм для сечения электрон-электронного рассеяния рассчитывался для дебаевского потенциала.

В серии работ (ICHIMARU et al., 1985a; MITAKE et al., 1985; TANAKA et al., 1985; YAN et al., 1985; ICHIMARU and TANAKA, 1985b) исследовалась двухкомпонентная электрон-ионная плазма. Авторы разработали теорию межчастичных корреляций в двухкомпонентной квантовой плазме на основе формализма диэлектрической проницаемости в рамках теории линейного отклика. Для электропроводности их результат представляет обобщение формулы Займана на случай ненулевых температур. При этом электрон-ионное взаимодействие было описано кулоновским потенциалом с динамическим экранированием в борновском приближении. Реальные вычисления были проведены для полностью ионизованной водородной плазмы. Параметр ион-ионной неидеальности был ограничен величиной $\Gamma = 2$.

Отметим результаты исследований Рёпке, Редмера и других авторов, посвященных коэффициентам переноса в плазме на основе метода функций Грина в сочетании с методом линейного отклика (EBELING et al., 1984; KRAEFT et al., 1986; RÖPKE, 1988; RÖPKE and REDMER, 1989).

Теперь более подробно рассмотрим расчетную модель, которая была использована для получения таблиц электро- и теплопроводности, содержащиеся в главе 10. Электропроводность σ и теплопроводность χ описаны в рамках τ -приближения следующими уравнениями (см. например LEE and MORE, 1984):

$$\begin{aligned} \sigma &= F_0, \\ \chi &= \frac{1}{T} \{F_2 - F_2^2 F_0^{-1}\}, \end{aligned} \quad (6.5.1)$$

где функции F_k зависят от частоты столкновений электронов $\nu(E)$:

$$F_k = -\frac{4}{3} \int \frac{1}{\nu(E)} E^{k+1} \frac{\partial f}{\partial E} \frac{dp}{(2\pi)^3}. \quad (6.5.2)$$

Здесь мы снова используем атомную систему единиц, $\hbar = m = e = 1$. Функция $f(E)$ равновесного распределения электронов по энергиям зависит от температуры T и нормирована на плотность числа электронов n . Интегрирование в уравнении (6.5.2) производится в импульсном пространстве ($p^2 = 2E$). Позже мы представим конкретные выражения для $\nu(E)$. Ли и Мор (LEE and MORE, 1984) выразили зависимость частоты столкновений электронов от энергии аналогично тому, как это было сделано для случая кулоновского рассеяния, в результате они получили соотношения:

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{n}{\nu} A_\sigma \left(\frac{\mu}{T} \right), \\ \chi &= \frac{nT}{\nu} A_\chi \left(\frac{\mu}{T} \right).\end{aligned}\tag{6.5.3}$$

Электропроводность σ и теплопроводность χ выражены через один и тот же параметр — среднюю частоту столкновений ν . В выражениях (6.5.3) фигурируют коэффициенты A_σ и A_χ , которые имеют значения в несколько единиц и зависят от температуры T и химического потенциала электронов μ . Средняя частота электрон-ионных столкновений, не включая ионы для разных степеней вырождения, выражена через кулоновский логарифм $\ln \Lambda$ и функции распределения Ферми-Дирака:

$$\nu_0 = \frac{2^{3/2} \pi Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{3T^{3/2}} \frac{I_{1/2}^{-1} \left(\frac{\mu}{T} \right)}{1 + \exp \left(-\frac{\mu}{T} \right)},\tag{6.5.4}$$

где Z_i — средний заряд иона, n_i — плотность числа ионов, а функции A_σ и A_χ равны:

$$\begin{aligned}A_\sigma &= \frac{4}{3} \frac{I_3}{\left[1 + \exp \left(-\frac{\mu}{T} \right) \right] I_{1/2}^2}, \\ A_\chi &= \frac{20}{9} \frac{\left(1 - \frac{16I_3^2}{15I_2I_4} \right) I_4}{\left[1 + \exp \left(-\frac{\mu}{T} \right) \right] I_{1/2}^2},\end{aligned}\tag{6.5.5}$$

где в качестве аргумента функций Ферми-Дирака I_α выступает отношение

ние μ/T . В предельном случае статистики Больцмана имеем:

$$\begin{aligned} \nu_0 &= \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{T^{3/2}}, \\ A_\sigma &= \frac{32}{3\pi}, \\ A_\chi &= \frac{128}{3\pi}, \end{aligned} \quad (6.5.6)$$

а в случае полностью ионизованной плазмы с вырожденными электронами (E_F — энергия Ферми):

$$\begin{aligned} \nu_0 &= \frac{\pi\sqrt{2}Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{E_F^{3/2}}, \\ A_\sigma &= 1, \\ A_\chi &= \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned} \quad (6.5.7)$$

Поскольку при выводе уравнения (6.5.4) предполагалось, что кулоновский логарифм $\ln \Lambda$ является функцией, слабо зависящей от энергии, применение уравнения (6.5.5) вряд ли разумно. Лучше воспользоваться следующими простыми интерполяционными формулами:

$$\begin{aligned} \nu_0 &= \frac{\pi\sqrt{2}Z_i^2 n_i \ln \Lambda(E_{ef})}{E_{ef}^{3/2}}, \\ A_\sigma &= \frac{32}{3\pi} \frac{E_{ef} - E_F}{E_{ef}} + \frac{E_{ef} - \frac{3T}{2}}{E_{ef}}, \\ A_\chi &= \frac{128}{3\pi} \frac{E_{ef} - E_F}{E_{ef}} + \frac{\pi^2}{3} \frac{E_{ef} - \frac{3T}{2}}{E_{ef}}, \end{aligned} \quad (6.5.8)$$

где эффективная энергия E_{ef} равна:

$$E_{ef} = E_F + \frac{3T}{2}.$$

Строго говоря, в данных формулах не учитывается электрон-электронное рассеяние. Для сильно ионизованной плазмы ($Z_i > 1$) данное приближение оказывается справедливым, поскольку сечение электрон-ионного рассеяния в Z_i^2 больше сечения электрон-электронного рассеяния. Более того, с ростом степени вырождения вклад электрон-электронного рассеяния

уменьшается вследствие принципа Паули. Спитцер и Хэрм (SPITZER and HARM, 1953) численно получили формулу, в которой учитывалось электрон-электронное рассеяние в случае невырожденной плазмы для $Z = 1$. В результате уравнения для лоренцевой плазмы сводятся к виду:

$$\begin{aligned}\sigma &\rightarrow \gamma_\sigma(Z_i)\sigma, \\ \chi &\rightarrow \gamma_\chi(Z_i)\chi,\end{aligned}\tag{6.5.9}$$

где $\gamma_\sigma(1) = 0,582$, $\gamma_\chi(1) = 0,236$. Значения коэффициентов γ_σ и γ_χ для случая $Z_i > 1$ определил Спитцер (SPITZER, 1962). В общем случае уравнение для γ_σ имеет вид (VAN ODERHOVEN and SCHRAM, 1985):

$$\gamma_\sigma(Z_i) = \frac{3\pi}{32} \left(1 + \frac{153Z_i^2 + 509Z_i}{64Z_i^2 + 345Z_i + 288} \right).\tag{6.5.10}$$

Для случая умеренного вырождения была предложена следующая интерполяционная формула (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988):

$$\gamma \rightarrow \gamma + (1 - \gamma) \frac{E_F}{E_F + \frac{3T}{2}},\tag{6.5.11}$$

с предельным переходом $\gamma \rightarrow 1$ при $E_F/T \rightarrow \infty$. Из уравнения (6.5.10) видно, что $\gamma \rightarrow 1$ при $Z_i \rightarrow \infty$.

Для того, чтобы применять формулу (6.5.11), необходимо вычислить частоту столкновения электронов с ионами $\nu(E)$. С одной стороны, ее значение зависит от параметров ионизационного равновесия в плазме, а, с другой стороны, — от характера кулоновских столкновений. Первый аспект мы обсуждали в разделах 6.1-6.4, поэтому сейчас остановимся на расчете кулоновского логарифма, значение которого определяет величину транспортного рассеяния электронов на ионе с зарядом Z_i :

$$\sigma_{tr} = \frac{\pi Z_i^2}{E^2} \ln \Lambda(E).\tag{6.5.12}$$

Здесь E — энергия относительного электрон-ионного движения. Напомним, что мы пользуемся атомными единицами ($\hbar = m = e = 1$).

Вследствие дальнедействующего характера кулоновских сил и значительного вклада далеких слабых столкновений, транспортное сечение логарифмически расходится. В кулоновской системе влияние среды на парное рассеяние оказывается решающим, что приводит к конечной величине

транспортного сечения, определяемого уравнением (6.5.12), в котором появляется так называемый кулоновский логарифм $\ln \Lambda(E)$.

В слабонеидеальной плазме взаимодействие ионов и электронов можно описать при помощи дебаевского экранирования кулоновского потенциала:

$$U(r) = -\frac{Z_i}{r} \exp\left(-\frac{r}{d}\right), \quad (6.5.13)$$

где d — радиус дебаевского экранирования. Для расчета термодинамических функций необходимо, чтобы в выражении для d учитывался как вклад ионов, так и электронов. Что касается нестационарных процессов, то несомненно, что ионы, обладающие гораздо большей массой, чем электроны, будут давать меньший вклад в экранирование. Однако попытки прийти к более точному решению данной задачи могли бы увести от широкодиапазонного подхода. Для приближенной оценки эффекта экранирования будем полагать, что d — это дебаевский радиус электронного экранирования. Для произвольных степеней вырождения его значение можно найти из уравнения:

$$d^{-2} = \frac{2\pi n}{T} \frac{I_{-1/2}\left(\frac{\mu}{T}\right)}{I_{1/2}\left(\frac{\mu}{T}\right)}, \quad (6.5.14)$$

где n — плотность числа электронов, T — температура, μ — химический потенциал, I_α — функция Ферми-Дирака, имеющая порядок α . В случае вырожденного электронного газа ($\mu/T \rightarrow \infty$) имеем:

$$d^{-2} = \frac{4\pi n}{T} \frac{3T}{2E_F} = 4 \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{1/3}. \quad (6.5.15)$$

В противоположном предельном случае статистики Больцмана ($\mu/T \rightarrow -\infty$):

$$d^{-2} = \frac{4\pi n}{T}. \quad (6.5.16)$$

Оба предельных случая учтены в следующей формуле:

$$d^{-2} = \frac{4\pi n}{T} \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{2\alpha}{3}\right)^2\right]^{1/2}}, \quad (6.5.17)$$

где $\alpha = E_F/T$ — параметр вырождения. Формула (6.5.17) воспроизводит точный результат с погрешностью в несколько процентов. Вообще говоря,

формула (6.5.13) строго справедлива для слабонеидеальной плазмы, когда $d \gg a$ (a – среднее расстояние между электронами). Очевидно, что эффективный радиус обрезания кулоновского потенциала (радиус экранирования) не может быть меньше среднего расстояния между электронами. Таким образом, для сильнонеидеальной плазмы в выражении (6.5.13) необходимо сделать замену $d \rightarrow a$. При выводе уравнения для расчета сечения рассеяния это будет учтено.

Теперь рассмотрим вопрос, касающийся эффективного транспортного сечения рассеяния электронов с энергией E на ионе в неидеальной плазме. При $Z_i E^{-1/2} \ll 1$ оказывается справедливым борновское приближение и квантовый кулоновский логарифм будет равен:

$$\ln \Lambda_q = \frac{1}{2} \left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{d}{\lambda} \right)^2 \right] - \frac{d^2}{d^2 + \lambda^2} \right\}, \quad (6.5.18)$$

где $\lambda = (8E)^{-1/2}$ – длина волны электрона. Значение кулоновского логарифма зависит от безразмерного параметра d/λ . Легко видеть, что следующая формула справедлива в обоих предельных случаях ($d/\lambda \ll 1$ и $d/\lambda \gg 1$), а в промежуточной области ее погрешность не превышает 10%:

$$\ln \Lambda_q = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{d}{\lambda} \right)^4 \right]. \quad (6.5.19)$$

Такая форма представления удобна для построения единых универсальных выражений для широкодиапазонного кулоновского логарифма и фактора Гаунта (см. раздел 7.1).

В противоположном предельном случае ($Z_i E^{-1/2} \gg 1$) реализуется классический механизм рассеяния. При этом кулоновский логарифм зависит от другого безразмерного параметра d/l ($l = Z_i/8E$ – характерное расстояние между ионом и электроном с энергией E). При $d/l \gg 1$ приходим к хорошо известному выражению для кулоновского логарифма:

$$\ln \Lambda_c = \ln \frac{d}{l}. \quad (6.5.20)$$

Логарифмическая точность выражения (6.5.20) удовлетворительна для больших значений аргумента. В разделе 7.1 мы приведем конкретное значение коэффициента в выражении для l , выбор которого определяется необходимостью построения единого выражения для динамической и статической проводимости (ИОЛИЩУК, 1989а, 1990).

При условии $d/l \ll 1$ характерное сечение рассеяния имеет порядок квадрата «геометрического размера иона» $(Z_i/E)^2$, что соответствует случаю $\ln \Lambda_c \approx 1$ (см. уравнение (6.5.12)). Точный расчет транспортного сечения рассеяния (LEE, 1977) подтверждает этот качественный вывод. Таким образом, появляется возможность построения единой интерполяционной формулы для классического кулоновского логарифма, совпадающей по форме с (6.5.19):

$$\ln \Lambda_c = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{d+l}{l} \right)^4 \right]. \quad (6.5.21)$$

Формулы (6.5.19) и (6.5.21) можно объединить в единое выражение, пригодное для описания столкновений в промежуточной области параметров (ПОЛИЩУК, 1989а):

$$\ln \Lambda_c = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{d+a+l \frac{l}{l+\lambda}}{l+\lambda} \right)^4 \right]. \quad (6.5.22)$$

Несмотря на свою простоту, формула (6.5.22) позволяет описать все важнейшие физические эффекты. Ниже мы покажем, что она позволяет описать множество экспериментальных результатов, полученных для плотной плазмы произвольной степени вырождения. Было показано (ПОЛИЩУК, 1990), что на основе формулы (6.5.22) можно вывести универсальное выражение для расчета динамической и статической проводимости сильно сжатой плазмы (см. раздел 7.1).

Выражение для транспортного сечения (6.5.12) в сочетании с формулой для кулоновского логарифма (6.5.22) позволяет определить частоту столкновений электронов с ионами $\nu_0(E) = n_i v \sigma_{tr}(E)$ ($v = (2E)^{1/2}$ — скорость электронов, n_i — плотность числа ионов).

Строго говоря, эффективная частота столкновений в плотной плазме должна учитывать явление интерференции волн, рассеянных разными центрами сил. Очевидно, что в этом случае результат должен зависеть от структурного фактора рассеивающих элементов:

$$\nu(E) = n_i v \int S(\Delta p) d\sigma_{tr}(\Delta p), \quad (6.5.23)$$

где Δp — переданный импульс, $\sigma_{tr}(\Delta p)$ — дифференциальное транспортное сечение рассеяния, $S(\Delta p)$ — структурный фактор ионов, представленный в виде зависимости от переданного импульса. Данную формулу пред-

ложил Займан (ZIMAN, 1969) в теории электропроводности жидких металлов. В случае кулоновского взаимодействия в интеграле (6.5.23) преобладает рассеяние со слабой передачей импульса Δp . Следовательно, для приближенной оценки данного интеграла можно приближенно заменить $S(\Delta p) \rightarrow S(0)$. Тогда получим

$$\nu(E) = n_i \nu \sigma_{tr}(E) S(0) = \nu_0 S(0). \quad (6.5.24)$$

Структурный фактор при нулевой передаче импульса $S(0)$ непосредственно связан с изотермической сжимаемостью X_T : $S(0) = n_i T X_T$. Применительно к кристаллам Займан (ZIMAN, 1968) предложил использовать следующую зависимость структурного фактора $S(0)$ от температуры плавления T_m :

$$S(0) = \frac{T}{37T_m}. \quad (6.5.25)$$

Принимая во внимание, что для широкодиапазонной модели достаточно обеспечить лишь умеренную точность расчетов, можно пренебречь разницей между значениями сжимаемости твердых и жидких веществ в критической точке (которая выражается фактором порядка 2), а также учесть тот факт, что при высоких температурах изотермическая сжимаемость стремится к величине $(n_i T)^{-1}$. Тогда приходим к следующей интерполяционной формуле (ПОЛИЦУК, 1989b):

$$S(0) = \frac{T}{37T_m + T}, \quad (6.5.26)$$

где при $T \gg T_m$ получаем $S(0) \rightarrow 1$. Также можно учесть зависимость температуры плавления T_m от плотности для случая однокомпонентной плазмы ионов с зарядом Z_i (ROGERS et al., 1983):

$$T_m = \frac{Z_i^2}{170R_0}, \quad (6.5.27)$$

где R_0 — радиус ячейки Вигнера-Зейтца. Применение данной формулы приводит к необходимости введения поправочного коэффициента, равного отношению экспериментального значения температуры плавления при нормальной плотности к расчетному.

Широкодиапазонный метод расчета электро- и теплопроводности строится на основе данных по степени ионизации, характеризуемой средним зарядом тяжелых частиц и плотностью свободных электронов. Включая параметры степени ионизации в рамки «обобщенной химической модели» для

расчета ионизационного равновесия (раздел 6.4), получаем, так называемую, WRTGCM модель для расчета электронных коэффициентов переноса в любой точке фазовой диаграммы.

Таблица 6.5.1. Удельное сопротивление (мкОм см) жидкостей в точке плавления. Экспериментальные данные η_{exp} представлены Эвансом и др. (EVANS et al., 1973). Расчетные данные: η_R (RINKER, 1988), η (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988).

Элемент	η_{exp}	η_R	η	Элемент	η_{exp}	η_R	η
Li	24	109	39	Rb	22	∞	114
Be	45	25	15	Sr	58	∞	78
B	210	34	13	Zr	153	10^4	32
Na	10	∞	65	Nb	105	964	29
Mg	27	672	36	Mo	61	468	22
Al	24	137	27	Ag	17	423	26
Si	80	234	27	Cd	34	994	33
S	∞	1387	41	In	33	10^4	41
Ca	25	∞	64	Sn	48	10^4	42
Ti	172	415	27	Sb	114	∞	46
V	71	146	22	Te	550	∞	52
Cr	32	119	19	Cs	37	∞	150
Mn	40	92	20	Ba	135	∞	93
Fe	139	85	20	La	138	∞	56
Co	102	74	19	Ta	118	1000	24
Ni	85	69	19	W	127	1000	21
Cu	21	68	20	Pt	73	541	21
Zn	37	80	26	Au	31	709	24
Ga	26	65	29	Hg	91	1000	37
Ge	67	688	30	Pb	95	∞	45
As	210	10^4	28	Bi	128	∞	26
Se	10^8	10^8	36	U	64	1000	30

В главе 10 приведены таблицы данных по ионизационному равновесию, значения тепло- и электропроводности плазмы алюминия, железа, меди, золота, свинца, висмута и урана. Данные рассчитаны на основе широкогодиапазонной модели WRTGCM.

Оценим погрешность расчета относительно экспериментальных результатов для разных областей фазовой диаграммы. В таблице 6.5.1 содержатся данные по удельному сопротивлению некоторых элементов, находящихся в жидком состоянии, в точке плавления. Среди них есть экспе-

Таблица 6.5.2. Теплопроводность χ ($\text{Вт м}^{-1} \text{К}^{-1}$) веществ в твердом состоянии при температуре в 300 К. Экспериментальные данные — χ_{exp} (BRANDES, 1983). Расчетные данные — χ_{calc} (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988)

Элемент	χ_{exp}	χ_{calc}	ЭЛЕМЕНТ	χ_{exp}	χ_{calc}
Li	71	29	Rb	36	6
Be	179	249	Sr		31
B	26	422	Zr	30	151
Na	150	14	Nb	53	249
Mg	173	62	Mo	138	298
Al	222	91	Ag	453	113
Si	152	151	Cd	93	43
S	0,2	26	In	80	26
Ca	98	40	Sn	60	29
Ti	22	162	Sb	19	46
V	31	233	Te	32	33
Cr	89	262	Cs	0,02	4
Mn	157	179	Ba		25
Fe	76	216	La	21	49
Co	70	224	Ta	45	309
Ni	67	220	W	154	390
Cu	401	160	Pt	74	223
Zn	112	66	Au	310	130
Ga	29	26	Hg	8	16
Ge	61	98	Pb	36	33
As		94	Bi	8	51
Se	0,8	33	U	27	110

риментальные данные (WILSON, 1965; BRANDES, 1983), вычисленные на основе широкодиапазонной модели WRTGCM и полученные по методике Ринкера (RINKER, 1985a). На рис. 6.5.1 сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных изображен графически. В таблице 6.5.2 содержатся данные по теплопроводности. Электропроводность металлов была измерена с помощью взрывающихся проволочек (GATHERS, 1983). По таблице 6.5.3 можно сравнить измеренные данные с расчетными. По таблицам 6.5.1, 6.5.2, 6.5.3 можно сделать вывод о хорошем соответствии между экспериментальными и расчетными данными по тепло- и электропроводности, полученными для случая неидеальной вырожденной плазмы в металлической конденсированной фазе.

Таблица 6.5.3. Расчетные значения электропроводности алюминия и меди в сравнении с экспериментальными данными (GATHERS, 1983)

	$T(K)$	$\rho(\text{г см}^{-3})$	$\sigma_{exp}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$	$\sigma_{calc}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$
Cu	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	$3,43 \cdot 10^4$	$1,8 \cdot 10^4$
	3500	6,42	$3,09 \cdot 10^4$	$1,5 \cdot 10^4$
Al	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	$1,33 \cdot 10^4$	$0,8 \cdot 10^4$

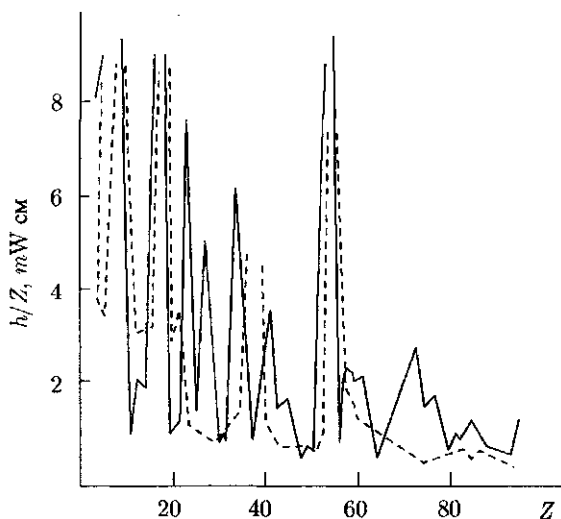
Рис. 6.5.1. Приведенное сопротивление для элементов периодической системы в нормальном состоянии. Z — заряд ядра. Сплошные линии — экспериментальные данные (WISLON, 1965; BRANDES, 1983). Пунктирные линии — широкодиапазонная модель (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1989)

Таблица 6.5.4. Расчетные значения электропроводности сильно сжатой плазмы инертных газов (ксенона, аргона, неона) в сравнении с экспериментальными данными (ИВАНОВ и др., 1976)

	$T(10^3 \text{ K})$	$\rho(\text{мг см}^{-3})$	$\sigma_{exp}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$	$\sigma_{calc}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$
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
	22,7	1300	930	630
	22,2	3,9	190	216
Ar	20,3	13	155	217
	19,3	32	170	222
	19,0	96	255	244
	17,8	172	245	243
	19,8	11	130	165
Ne	19,6	36	165	179

Таблица 6.5.5. Расчетные значения электропроводности сильно сжатой ксеноновой плазмы в сравнении с экспериментальными данными (ФОРТОВ и др., 1976)

$T(10^3 \text{ K})$	$\rho(\text{мг см}^{-3})$	$\sigma_{exp}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$	$\sigma_{calc}(\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1})$
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

Иванов и др. (ИВАНОВ и др., 1976), а также Фортов и др. (ФОРТОВ и др., 1980) проводили экспериментальные исследования электропроводности неидеальной классической плазмы инертных газов, сжатой ударными волнами. В таблице 6.5.4 приведены экспериментальные данные, полученные Ивановым и др., в сравнении с расчетными данными на основе модели WRTGCM. В таблице 6.5.5 представлен аналогичный сравнительный анализ для данных, полученных Фортвым и др.

ГЛАВА 7

Поглощение лазерного излучения и торможение ионных пучков в плазме

7.1. Тормозное излучение и динамическая проводимость

Одним из механизмов, определяющих излучение и поглощение света в плазме связан с переходами между электронными состояниями непрерывного спектра вызванными взаимодействиями электронов и ионов. В классической механике подобные взаимодействия вызывают ускоренное движение электронов, что приводит к излучению и поглощению электромагнитных волн. Такой механизм взаимодействия света с веществом носит название тормозного излучения. В полностью ионизованной, а также в частично ионизованной плазме в области сравнительно низких частот тормозное излучение играет очень важную роль. Известно, что динамическая проводимость связана с мнимой частью диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega)$. Поскольку в случае полностью ионизованной плазмы эта величина определяется столкновениями электронов с ионами, между коэффициентом тормозного излучения при поглощении света и динамической диэлектрической проницаемостью существует взаимосвязь. По этой причине создание широкодиапазонной формулы для расчета $\epsilon(\omega)$ значительно обесценивается. В низкочастотном пределе динамическая проводимость обуславливает статическую проводимость, речь о которой шла в разделе 6.5. То есть, с одной стороны, метод, включающий физические факторы, на основе которых вычисляется электропроводность, можно непосредственно применить для расчета динамической проводимости. С другой стороны, при выборе физической модели, используемой для расчета электропроводности, косвенным аргументом может служить хорошее описание экспериментальных данных по оптическим свойствам.

Кратко опишем современное состояние проблемы расчета спектра тормозного излучения плазмы. Причем, нас интересуют лишь такие методы, которые оказываются применимыми для широкого диапазона параметров.

Широкоизвестные результаты для тормозного излучения в плазме в пределе борновского и классического рассеяния (ЗЕЛЬДОВИЧ, РАЙЗЕР, 1968), ограничены случаем классической идеальной плазмы. Известный точный результат Зоммерфельда (SOMMERFELD, 1956) справедлив лишь для чисто кулоновских потенциалов, к тому же его реализация трудоемка в вычислительном плане, поэтому исследования предельных случаев продолжают до сих пор (БЕРЕСТЕЦКИЙ и др., 1968; SCOTT, 1975; ГЕРВИЦ, КОГАН, 1976). Для расчета тормозного излучения в плазме в работе (ROZSNYAL, 1979), используется аналитический экранированный электрон-ионный потенциал. При этом принимается во внимание его «некулоновский» характер, однако модель ограничена борновским приближением. В работе (LAMOUREUX et al., 1982; FENG et al., 1983) рассчитан спектр тормозного излучения для потенциала Томаса-Ферми посредством численного решения уравнения Дирака. При этом авторам удалось исследовать влияние «некулоновского» характера потенциала ионно-атомного взаимодействия на спектр излучения. В упомянутых публикациях не обсуждался вопрос об усреднении результатов по функции распределения электронов по энергиям. Уотсон (WATSON, 1970) исследовал влияние ионных корреляций на спектр тормозного излучения, которое в этом случае оказалось несущественным.

Следующая группа исследований посвящена изучению оптических свойств металлов. Кристаллические металлы исследовались на основе метода функционала плотности (МАКСИМОВ и др., 1988). В книге Боброва и Тригера (БОБРОВ, ТРИГЕР, 1984), а также монографии Коваленко и др. (КОВАЛЕНКО и др., 1990) описывается общее состояние проблемы исследования оптических свойств жидких металлов. Приведенные там результаты могут служить эталонными для создания различных приближенных методов, поскольку они разработаны из первых принципов и в них учитываются такие важные и тонкие эффекты, как динамическое экранирование и межчастичные корреляции. Недостатком данных подходов является необходимость использования методов численного интегрирования, а также сравнительно узкая область применимости, связанная с использованием теории возмущений и эмпирического псевдопотенциала. В указанных работах отсутствуют численные данные и не реализован широкодиапазонный метод расчета динамической проводимости. В работе (ПОЛИЩУК, 1989b, 1990) сделана попытка построить подобный метод для описания тормозного излучения. Опираясь на эти работы, мы рассмотрим ниже проблему расчета спектрального коэффициента поглощения — ключевой величины для оптической и статической проводимости. Также мы затронем вопросы, касающиеся некулоновского характера потенциала и плазменных колебаний,

которые приобретают особое значение для плазмы экстремальных состояний.

Сначала рассмотрим общие соотношения для спектрального коэффициента поглощения. Энергия излучения в спектральном диапазоне $(\omega, \omega + d\omega)$, поглощенная единицей объема в единицу времени электронами, начальные скорости которых заключены в интервале значений $(v, v + dv)$, вследствие тормозного излучения равна:

$$d\varepsilon(\omega, v) = \frac{d\sigma^a}{d\omega} n_i [nvg(v)dv] \omega d\omega, \quad (7.1.1)$$

где $d\sigma^a/d\omega$ — сечение поглощения тормозного излучения, приходящегося на один ион; n_i и n — плотность числа ионов и электронов, соответственно; $g(v)$ — функция распределения электронов по скоростям. Выражение в скобках определяет поток налетающих электронов. Напомним, что мы используем атомные единицы. Учитывая, что поток энергии фотонов в том же спектральном диапазоне равен

$$dj_\omega = \frac{n_\omega \omega^3 d\omega}{\pi^2 c^2}, \quad (7.1.2)$$

приходим к следующему выражению для расчета спектрального коэффициента поглощения:

$$dn_\omega^a(E) = \frac{\pi^2 c^2}{n_\omega} \frac{d\sigma^a(E, \omega)}{d\omega} \frac{n_i n}{\omega^2} \left(\frac{2E}{\omega}\right)^{1/2} g(E) dE, \quad (7.1.3)$$

здесь мы перешли от переменной v к переменной $E = mv^2/2$, m — масса электрона, n_ω — общее количество фотонов с энергией ω .

Принцип детального равновесия (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1989) позволяет прийти к следующей связи между сечением поглощения $d\sigma^a/d\omega$ и сечением индуцированного излучения $d\sigma^e/d\omega$:

$$\frac{\frac{d\sigma^a(E, \omega)}{d\omega}}{\frac{d\sigma^e(E + \omega, \omega)}{d\omega}} = \frac{E + \omega}{E}. \quad (7.1.4)$$

Заметим, что E и $E + \omega$ — энергия исходных состояний для поглощения и излучения, соответственно. Спектральный коэффициент индуцированного

излучения $d\eta_{\omega}^e(E + \omega)$ записывается аналогично выражению (7.1.3), только верхний индекс a заменяется на e , а параметр E — на $E + \omega$. Усредненный по значениям энергии электронов спектральный коэффициент поглощения равен:

$$\bar{\eta}(\omega) = \int_{E=0}^{E=\infty} \{d\eta_{\omega}^a(E) - d\eta_{\omega}^e(E + \omega)\}. \quad (7.1.5)$$

Запишем функцию распределения электронов:

$$g(E) = AE^{1/2} f_F(E).$$

Ее значение нормировано на единицу, f_F — функция Ферми; A — нормировочный множитель, значение которого зависит от температуры и химического потенциала электронов. Из уравнений (7.1.3)–(7.1.4) следует:

$$\eta(\omega) = n_i n \frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} dE E (f_F(E) - f_F(E + \omega)) \frac{d\sigma^a(E, \omega)}{d\omega}. \quad (7.1.6)$$

Хотя при построении уравнения (7.1.6) мы допустили, что вероятности перехода не зависят от чисел заполнения энергетических уровней, оно является справедливым и в том случае, когда учитывается принцип запрета Паули.

Рассмотрим предельные случаи классического рассеяния в приближении Борна–Эльверта. Для определенности остановимся на процессах поглощения. Как правило, вводят фактор Гаунта $G^a(E, \omega)$, описывающий отличие от формулы Крамерса (в формуле Крамерса $G = 1$):

$$\frac{d\sigma^a(E, \omega)}{d\omega} E = \frac{8\pi Z_i^2 n \omega}{3^{3/2} c^3 \omega} G^a(E, \omega), \quad (7.1.7)$$

где Z_i — заряд иона, E — энергия движения электрона. Поскольку ее значение в процессе поглощения существенно изменяется, встает вопрос о применимости разных приближений и их сшивки.

При условии $(E + \omega)^{1/2}/Z_i \ll 1$, автоматически выполняется неравенство $E^{1/2}/Z_i \ll 1$, так что можно воспользоваться уравнениями классической механики. Приближение Борна–Эльверта (ELVERT, 1939) справедливо при $Z_i/(E + \omega)^{1/2} \ll 1$ независимо от значения $Z_i/E^{1/2}$. При условии $Z_i/E^{1/2} \ll 1$ применимо борновское приближение. Таким образом, сшивка двух приближений может производиться по одному параметру $Z_i/(E + \omega)^{1/2}$.

В случае классического рассеяния фактор Гаунта зависит от параметра vZ_e/ω^3 (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1982), который можно записать в виде отношения максимального и минимального прицельных параметров, $b_{\max} = v/4\omega$ и $b_{\min} = Z_e/8E$. Параметр b_{\min}^c является расстоянием наибольшего сближения, а значение b_{\max}^c соответствует времени взаимодействия, равному $1/\omega$. При больших расстояниях излучение с частотой ω маловероятно. Для предельных случаев известны точные результаты и мы имеем:

$$\begin{aligned} G_c^a &= 1, & b_{\max}^c &\ll b_{\min}^c, \\ G_c^a &= \frac{3^{1/2}}{\pi} \ln \left(\frac{b_{\max}^c}{b_{\min}^c} \right), & b_{\min}^c &\ll b_{\max}^c. \end{aligned} \quad (7.1.8)$$

Для описания случаев и ближних и дальних столкновений предлагается следующая интерполяционная формула:

$$G_c^a = \ln \left[e + \left(\frac{b_{\max}^c}{b_{\min}^c} \right)^{1/2} \right], \quad (7.1.9)$$

при этом для простоты принимаем $3^{1/2}/\pi \simeq 1/2$.

В случае квантового рассеяния (т.е. когда используется приближение Борна-Эльверта) фактор Гаунта известен точно (ЗЕЛЬДОВИЧ, РАЙЗЕР, 1966);

$$G_q^a(E, \omega) = \frac{3^{1/2}}{\pi} \ln \left[1 + 2 \frac{[E(E + \omega)]^{1/2}}{\omega} + 2 \frac{E}{\omega} \right] \varepsilon^a(E, \omega), \quad (7.1.10)$$

где фактор Эльверта для поглощения ε^a равен (ELVERT, 1939):

$$\varepsilon^a(E, \omega) = \left(\frac{E + \omega}{E} \right)^{1/2} \frac{1 - \exp \left(\frac{2^{1/2} \pi Z_e}{(E + \omega)^{1/2}} \right)}{1 - \exp \left(\frac{2^{1/2} \pi Z_e}{E^{1/2}} \right)}. \quad (7.1.11)$$

Соотношение (7.1.10) удобно заменить интерполяционной формулой

$$G_q^a = \ln \left[1 + \left(\frac{b_{\max}^q}{b_{\min}^q} \right)^{1/2} \right] \varepsilon^a(E, \omega). \quad (7.1.12)$$

В предельных случаях $b_{\max}^q \gg b_{\min}^q$ и обратном выражения под знаком логарифма в уравнениях (7.1.10) и (7.1.12) совпадают, а в промежуточной области они близки. Для квантового рассеяния введены следующие определения: $b_{\max}^q = v/4\omega$ и $b_{\min}^q = (8E)^{-1/2}$ (для максимального и минимального прицельного расстояния частицы, соответственно). b_{\min}^q — длина волны электрона. Условие $b_{\min}^q \gg b_{\min}^c$ совпадает с условием применимости борновского приближения. Два предельных случая (7.1.11) и (7.1.12) могут быть сшиты единой формулой:

$$G^a(E, \omega) = G_0 \ln \left[\frac{\tilde{e}Z_i + E^{1/2}}{Z_i + E^{1/2}} + \left(\frac{b_{\max}}{b_{\min}} \right)^\alpha \right] \tilde{\varepsilon}^a(E, \omega), \quad (7.1.13)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}, \quad G_0 = 1, \quad \tilde{e} = e, \\ b_{\max} &= b_{\max}^c = b_{\max}^q, \\ b_{\min} &= b_{\min}^c = b_{\min}^q. \end{aligned}$$

Обобщенная поправка Эльверта в соответствии с обсуждением в начале этого раздела может быть представлена в виде интерполяционной формулы:

$$\tilde{\varepsilon}^a(E, \omega) = \varepsilon^a(E, \omega) \left[1 + \left(\left(\frac{E + \omega}{E} \right)^{1/2} - 1 \right) \exp \left(- \frac{2^{1/2} \pi Z_i}{(E + \omega)^{1/2}} \right) \right]. \quad (7.1.14)$$

Для вычисления по формуле (7.1.6) значения $\tilde{\eta}(\omega)$ достаточно знать лишь усредненный фактор Гауята:

$$\tilde{G}^a(\omega) = A \int_0^\infty G^a(E, \omega) [f_F(E) - f_F(E + \omega)] dE. \quad (7.1.15)$$

В предельном случае статистики Больцмана можно применить к интегралу (7.1.15) теорему о среднем, в результате получим:

$$\tilde{G}_B^a = A \left[1 - \exp \left(- \frac{\omega}{T} \right) \right] e^{\frac{\mu}{T}} G^a(\xi T, \omega), \quad (7.1.16)$$

где ξ — функция порядка единицы, зависящая от T . Ее определение будет дано ниже.

Если принять во внимание ступенчатый характер функции $f_F(E)$, для случая вырожденного электронного газа имеем:

$$\tilde{G}_F^a = A \int_{\max(E_F - \omega, 0)}^{E_F} G^a(E, \omega) d\omega, \quad (7.1.17)$$

где E_F — энергия Ферми. Для низких частот, $\omega \ll E_F$, справедливо равенство $\tilde{G}_F^a = A\omega G^a(E_F, \omega)$. При высоких частотах, $\omega \gg E_F$, в области применимости приближения Борна-Эльверта, интеграл (7.1.17) вычисляется явно в предельном случае борновского приближения $Z_i/E_F^{1/2} \ll 1$ и для предельного случая $Z_i/E_F^{1/2} \gg 1$. Таким образом, в общем случае справедлива следующая интерполяционная формула:

$$\tilde{G}_F^a(\omega) = A \frac{2}{3} E_F G^a(E_F, \omega), \quad (7.1.18)$$

В случае классического рассеяния в области высоких частот ($G^a \approx 1$) погрешность данного приближения составляет $\sim 30\%$.

Оба случая высоких и низких частот можно свести формулой:

$$\tilde{G}_F^a = A \left(1 - \exp \frac{-3\omega}{2E_F} \right) \frac{2}{3} E_F G^a(E_F, \omega). \quad (7.1.19)$$

Учитывая, что нормировочный множитель A в статистике Больцмана и Ферми принимает, соответственно, значения

$$A_B = \frac{2 \exp(-\mu/T)}{\pi^{1/2} T^{3/2}} \quad \text{и} \quad A_F = \frac{3}{2E_F^{3/2}},$$

можем записать для данных предельных случаев:

$$\bar{\eta}_B = n_i n \frac{2^{9/2} \pi^{5/2} Z_i^2}{3^{3/2} \omega^3 T^{1/2} c} \left(1 - e^{-\frac{\omega}{T}} \right) G^a(\xi T, \omega), \quad (7.1.20)$$

$$\bar{\eta}_F = n_i n \frac{2^{7/2} \pi^3 Z_i^2}{3^{3/2} \omega^3 E_F^{1/2} c} \left(1 - e^{-\frac{3\omega}{2E_F}} \right) G^a(E_F, \omega). \quad (7.1.21)$$

Неизвестный параметр ξ , фигурирующий в (7.1.20), определим из сравнения с точными результатами, полученными для случая борновского рассеяния и статистики Больцмана (ПЕРЕЛЬ, ЭЛИАШБЕРГ, 1961). При

$\omega \ll T$ имеем $\xi = 2,2$ и $\bar{\eta}_B \approx \ln \xi$, тогда как при $\omega \gg T - \xi = 1$ и $\bar{\eta}_B \approx \xi^{1/2}$. Если взять среднее значение $\xi = \frac{3}{2}$, погрешность приближения будет порядка 20%. Для случая классического рассеяния мы возьмем это же значение ξ , поскольку при сравнительно низких температурах $G^a = 1$, а при высоких температурах зависимость параметра G^a от ξ имеет слабо выраженный логарифмический характер.

В ряде случаев, вместо расчета эффективного коэффициента поглощения $\bar{\eta}(\omega)$, удобнее оперировать понятием динамической проводимости $\sigma(\omega)$, которая связана с динамической частотой столкновений $\nu(\omega)$ и параметром $\bar{\eta}(\omega)$ соотношениями:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2 \nu(\omega)}{\omega^2}, \\ \sigma(\omega) &= \frac{c}{4\pi} \bar{\eta}(\omega), \end{aligned} \quad (7.1.22)$$

при $\omega \gg \nu$. Другое соотношение между σ и $\bar{\eta}$ (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1982) следует из электродинамики. Выражения (7.1.20) и (7.1.21) имеют аналогичную структуру, каждое из них можно получить из другого, если произвести подстановку $E_F \longleftrightarrow 3T/2$. Пренебрегая тем фактом, что замена приводит к погрешности 20% в численном коэффициенте, получаем следующую интерполяционную формулу для расчета частоты столкновений:

$$\nu(\omega) = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\pi^2}{\omega} \frac{Z_i^2}{E_{ef}^{1/2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{3\omega}{2E_{ef}}\right) \right] G^a(E_{ef}, \omega). \quad (7.1.23)$$

Сделаем одно необходимое уточнение. При выводе уравнения (7.1.23) мы пренебрегли эффектом экранирования кулоновского взаимодействия в плазме. Это справедливо, если $b_{\max} = v_{ef}/4\omega \leq d$ или $\omega \geq 3^{1/2}\omega_p/4$ (d — дебаевский радиус экранирования, $d = v_{ef}/3^{1/2}\omega_p$). Для распространения формул (7.1.20) и (7.1.21) на случай $\omega \leq 3^{1/2}\omega_p/4$, в качестве b_{\max} необходимо выбрать:

$$b_{\max} = \min \left\{ \frac{v_{ef}}{4\omega}, d \right\}. \quad (7.1.24)$$

Рассмотрим формальный предел $\omega \ll 3^{1/2}\omega_p/4$ для формулы (7.1.23). В этом случае получаем

$$\nu(0) = \pi^2 \frac{Z_i^2}{E_{ef}^{3/2}} G^a(E_{ef}, 0). \quad (7.1.25)$$

Сравнивая фактор Гаунта (7.1.13) и кулоновский логарифм (6.5.22) в области высоких значений обоих параметров, приходим к соотношению:

$$2G^a(E_{ef}, 0) = \ln \Lambda(E_{ef}). \quad (7.1.26)$$

Как и следовало ожидать, $\nu(0) = \nu_0$. Погрешность данного уравнения не превышает 20%. Это, как было отмечено выше, вызвано процедурой сшивки при переходе к единой приближенной формуле.

Можно расширить область применения соотношения (7.1.26) так, чтобы оно стало справедливым для всех значений кулоновского логарифма, а уравнение (7.1.13) можно было бы применять для расчета фактора Гаунта. Для этого необходимо обобщить численные коэффициенты:

$$\begin{aligned} G_0 &= 1 - \frac{7}{8} \frac{3^{1/2} \omega_p}{4\omega + 3^{1/2} \omega_p}, \\ \alpha &= \frac{1}{2} + \frac{7}{2} \frac{3^{1/2} \omega_p}{4\omega + 3^{1/2} \omega_p}, \\ \bar{e} &= 1 + (e - 1) \frac{4\omega}{4\omega + 3^{1/2} \omega_p}. \end{aligned} \quad (7.1.27)$$

С учетом выражений (7.1.24) и (6.5.22) модифицировано также выражение для b_{\max} :

$$b_{\max} = \min \left(\frac{v_{ef}}{4\omega}, d + a + \frac{b_{\min}^c b_{\min}^c}{b_{\min}} \right), \quad (7.1.28)$$

где a — среднее расстояние между электронами (см. раздел 6.5). Частота столкновений $\nu(\omega)$ для всех частот определяется из уравнений (7.1.23), (7.1.27) и (7.1.28). С учетом вышесказанного приходим к универсальному выражению для $\sigma(\omega)$ (или для $\bar{\eta}$):

$$\sigma(\omega) = \frac{C}{4\omega} \bar{\eta}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2 \omega^2 \nu_{ef}(\omega)}{\omega^4 + \omega^2 \nu_{ef}^2(\omega)}, \quad (7.1.29)$$

с частотой столкновений модифицированной с учетом ионных корреляций (см. раздел 6.5):

$$\begin{aligned} \nu_{ef}(\omega) &= \left(\frac{\omega}{\omega + \bar{\nu}} \nu(\omega) + \frac{\bar{\nu}}{\omega + \bar{\nu}} \nu(0) A_\sigma^{-1} \right) S(0), \\ \bar{\nu} &= \frac{\nu(\omega) + \nu(0) A_\sigma^{-1}}{2} S(0). \end{aligned} \quad (7.1.30)$$

Величина $S(0)$ определяется из уравнения (6.5.26), а значение A_σ — из уравнения (6.5.8).

Как известно, статическую проводимость и тормозное поглощение в слабо неидеальной плазме, а также статическую проводимость металлов (как показано в разделе 6.5) хорошо описывают уравнения (7.1.23), (7.1.27) и (7.1.29). Чтобы оценить их применимость для описания коэффициентов поглощения в сильно неидеальной плазме, мы рассчитали динамическую проводимость ряда жидких металлов в оптическом диапазоне частот. При расчете оптических свойств вещества в области высоких частот необходимо учитывать так называемые связанно-связанные и связанно-свободные переходы. Результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными показаны на рис. 7.1.1. Видно, что между ними достигается даже большее соответствие, чем для расчетов по модели Друде. Так как предложенная нами формула для $\sigma(\omega)$ имеет более широкую область применимости.

Более точные расчеты в данной области провели Бобров и Тригер (БОБРОВ, ТРИГЕР, 1984) для жидкого натрия. Они исследовали применимость различных приближений для учета корреляционных эффектов в электронном газе при описании оптических свойств. Несомненно, их исследования имеют лучшую теоретическую основу, нежели широкодиапазонная модель. Тем не менее, в этом случае погрешность расчетов же достаточно высока (см. рис. 7.1.2). На рис. 7.1.2 также показаны результаты расчетов с использованием уравнения (7.1.29). Наряду с этим наблюдается значительное несоответствие и между различными экспериментальными данными, например (INAGAKI et al., 1976) и (MAYER and HTEL, 1966). С учетом вышесказанного представляется целесообразным применение изложенных методов расчета (ПОЛИЩУК, 1989б, 1990), простота которых удачно сочетается с возможностью применения для крупномасштабных расчетов.

До сих пор мы считали, что ион является точечной частицей с зарядом Z_i . Однако, в высокотемпературной плазме с энергией электронов, превышающей 1 кэВ, электроны могут проникать внутрь электронных оболочек иона с зарядом ядра Z и «чувствовать» большие заряды, нежели Z_i .

Представим потенциал взаимодействия электрона с атомом в виде:

$$U(r) = \frac{Z(r)}{r}, \quad (7.1.31)$$

$$Z(r) = Z_i + (Z - Z_i) \exp(-\beta r).$$

Значение β можно оценить, например, по формуле $\beta = 1,8Z^{4/3}/(Z - Z_i)$ (МАЕВ, 1970).

В квантовом случае $Z_i/E^{1/2} \ll 1$ амплитуды переходов определяются

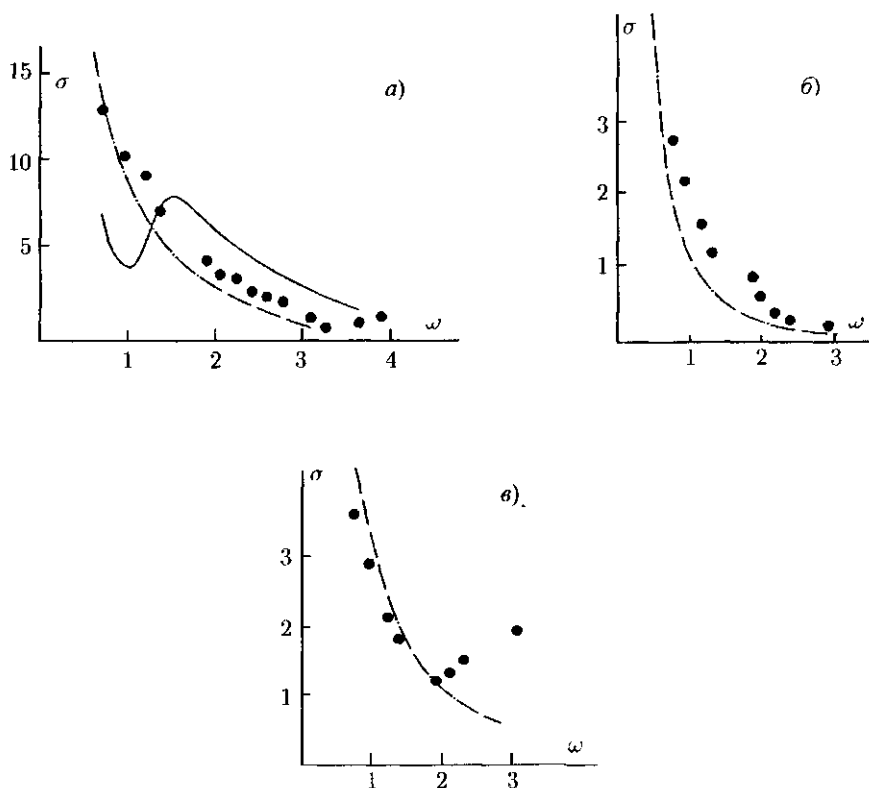


Рис. 7.1.1. Сравнение экспериментальных данных по оптической проводимости σ (в 10^{15} c^{-1}) (MILLER, 1969) с использованием широкодиапазонной модели (ПОЛИЩУК, 1989a,b); σ представлены в зависимости от ω (в эВ). а) алюминий: сплошная линия — $t = 20^\circ\text{C}$ (твердое состояние), жирные точки — $t = 900^\circ\text{C}$ (жидкость). б) медь: жидкость, точка плавления. в) серебро: жидкость, точка плавления

Фурье-образом потенциала $U(r)$. Сравнивая его с образом кулоновского потенциала для момента $k = (2E)^{1/2}$, получаем выражение для эффективного заряда:

$$Z_q = \frac{2EZ + Z_i\beta^2}{2E + \beta^2}, \quad (7.1.32)$$

откуда следует, что эффективный заряд равен Z_i при низких энергиях и Z — при высоких энергиях.

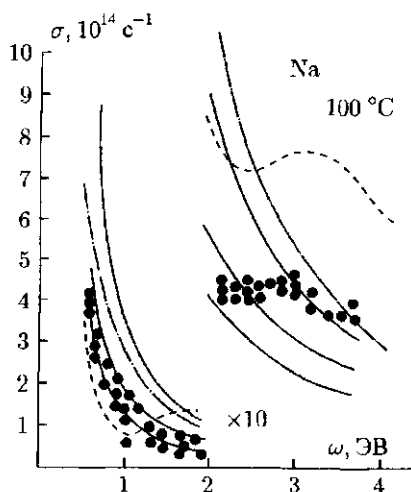


Рис. 7.1.2. Динамическая проводимость σ жидкого натрия. Экспериментальные данные: жирные точки — INAGAKI et al. (1976), пунктирная линия — MAYER and ПИТЕЛ (1966). Расчетные данные: штрихпунктирная линия — широкодиапазонная модель (ПОЛИЩУК, 1989a,b), сплошные линии — БОБРОВ, ТРИГЕР (1984) (разные модели межэлектронных корреляций)

В классическом случае задача усложняется. Для частотного диапазона $\omega \gg E^{3/2}/Z_i$ справедливо так называемое «вращательное» приближение (ГЕРВИЦ, КОГАН, 1976; КОГАН, КУКУШКИН, 1983). Его применимость может быть продемонстрирована при помощи следующих качественных рассуждений (ПОЛИЩУК, 1989b, 1990). Максимальное тормозное излучение электронов с энергией E на данной траектории определяемой прицельным расстоянием ρ , приходится на тот участок, на котором взаимодействие с ионом максимально (т.е. при расстоянии наибольшего сближения r_ω). Кроме того, оно зависит от характерной частоты излучения $\omega \approx v_\omega/r_\omega$ (v_ω — скорость на данном участке траектории).

Предполагая, что $r_\omega \ll \rho$, из закона сохранения энергии находим: $r_\omega \approx E\rho^2/Z(r_\omega)$. Закон сохранения момента импульса приводит к оценке $v_\omega \approx (2E)^{1/2}/r_\omega$. Исключая ρ из этих соотношений, получим уравнение для параметра r_ω , определяющего величину эффективного заряда $Z_\omega = Z(r_\omega)$:

$$Z(r_\omega) = \frac{\omega^2 r_\omega^2}{2}. \quad (7.1.33)$$

Данная формула и соответствует «вращательному» приближению. Понятно, что сделанное нами допущение $r_\omega \ll \rho$ ограничивает диапазон частот $\omega \gg E^{3/2}/Z_i$, совпадающий с условием классичности $E^{1/2} \ll Z_i$ при максимально возможном значении $\omega = E$. Уравнение (7.1.33), в котором вместо $Z(r)$ фигурирует выражение из (7.1.31), нельзя решить аналитически. Однако хорошим приближением для решения служат выражения:

$$\begin{aligned} E_i^2 &= \beta^3(Z + Z_i), \\ r_\omega^3 &= \frac{2}{E^2} \frac{Z_i E_i + Z E}{E_i + E}. \end{aligned} \quad (7.1.34)$$

Оно удовлетворяет уравнению (7.1.33) с точностью до несколько процентов.

Для низких частот, $\omega \ll E^{3/2}/Z_i$, характерное расстояние упругого столкновения можно оценить, если приравнять потенциальную и кинетическую энергии:

$$Z(r_0) = E r_0. \quad (7.1.35)$$

Приближенное аналитическое решение данного уравнения с той же точностью может быть записано в форме:

$$\begin{aligned} r_0 &= \frac{E_0 Z_i + E Z}{E(E_0 + E)}, \\ E_0 &= \frac{Z + Z_i}{2\beta}. \end{aligned} \quad (7.1.36)$$

Значения $Z(r_E)$ и $Z(r_0)$ отличаются незначительно, причем $Z(r_E) > Z(r_0)$. Для промежуточной области частот можно предложить линейную интерполяцию для эффективного заряда:

$$Z_c = Z(r_0) + \frac{Z(r_E) - Z(r_0)}{E} \omega. \quad (7.1.37)$$

Квантовые поправки к значениям Z_c можно учесть следующим образом:

$$Z_{ef}(E, \omega) = \frac{Z_c \xi + Z_q}{\xi + 1}, \quad \xi = \frac{Z_c}{E^{1/2}}. \quad (7.1.38)$$

Видно, что в классическом ($\xi \gg 1$) и квантовом ($\xi \ll 1$) пределах значения Z_{ef} совпадают со значениями Z_c и Z_q , соответственно.

Для учета влияния некулоновских эффектов используется фактор Гаунта g^e , значение которого нормировано на заряд ядра иона. С учетом соотношения между факторами Гаунта для поглощения и излучения, а также выражения (7.1.38) для эффективного заряда получим для излучения:

$$g^e(E, \omega) = \left(\frac{Z_{ef}}{Z} \right) G^a(E - \omega, \omega). \quad (7.1.39)$$

В приведенных ранее формулах для G^a необходимо заменить параметр Z_i на Z_{ef} .

В работах (LAMOUREUX et al., 1982; FENG et al., 1983) был рассчитан фактор Гаунта g^e для плазмы экстремальных параметров с помощью решения уравнения Дирака для волновых функций инфинитного движения электронов в потенциале Томаса–Ферми при заданных значениях температуры и плотности. На рис. 7.1.3 приведены результаты этих расчетов в сравнении с результатами расчета, полученными с помощью уравнения (7.1.39) для плотной плазмы золота. Ионизационное равновесие было рассчитано при помощи пирокдиапазонного аналитического метода (БЕСПАЛОВ, ПОЛИЩУК, 1988, 1989а). Видно, что широкодиапазонная модель (7.1.39) адекватно учитывает некулоновские эффекты. Параметр g^e слабо зависит от отношения ω/E .

Теперь оценим влияние экранирования вследствие колебаний плазмы на динамическую частоту столкновений. Частоту столкновений будем определять в борновском приближении с учетом динамического характера электронного экранирования (БОБРОВ, ТРИГЕР, 1984):

$$\nu(\omega) = \frac{1}{12Z_i} \int \frac{dk}{(2\pi)^3} |U(k)|^2 k^4 S(k) \frac{\text{Im}\varepsilon(k, \omega)}{|\varepsilon(k, \omega)|^2}. \quad (7.1.40)$$

Здесь $U(k)$ — Фурье-образ электрон-ионного потенциала для кулоновского поля $4\pi Z_i/k^2$, $S(k)$ — статический структурный фактор иона, $\varepsilon(k, \omega)$ — диэлектрическая проницаемость. Вычислим вклад плазменных колебаний в $\nu(\omega)$, который определяется существованием полюсов подынтегральной функции в уравнении (7.1.40), т.е. нулевыми значениями функции $\varepsilon(k, \omega)$.

Нетрудно показать, что в двух предельных случаях $\omega \ll \omega_p$ и $\omega \gg \omega_p$ уравнение (7.1.40) приводит к таким же результатам, что и уравнения (7.1.13), (7.1.23), (7.1.27) и (7.1.28), при условии применимости борновского приближения.

Строго говоря, интерполяционная формула (7.1.13) не включает полюс подынтегрального выражения для (7.1.40). Для оценки вклада полюс-

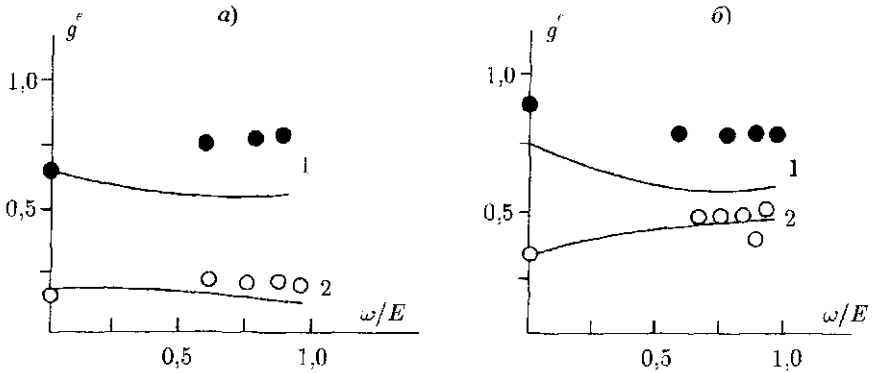


Рис. 7.1.3. Приведенный фактор Гаунта g^e для тормозного излучения электронов в плазме золота. Плотность $\rho = 19 \text{ г см}^{-3}$. Энергия электронов E : 1 – 10 кэВ, 2 – 1 кэВ. а – $T = 1$ кэВ, б – 10 кэВ. Расчетные данные: темные и светлые точки – LAMOUREUX and PRATT (1983), PRATT (1987); сплошные линии – широкодиапазонная модель (ПОЛИЦУК, 1989б, 1990)

сов, предположим, что затухание по Ландау мало:

$$\frac{\text{Im}\varepsilon(k, \omega)}{|\varepsilon(k, \omega)|^2} \simeq \pi \delta[\text{Re}\varepsilon(k, \omega)]. \quad (7.1.41)$$

Это дает возможность оценить вклад плазменных колебаний в $\nu(\omega)$:

$$\nu_{p1}(\omega) = \frac{2Z_i}{3} S(k) \frac{k^2}{\omega} \left. \frac{d\text{Re}\varepsilon(k, \omega)}{dk} \right|_{k=k_\omega}, \quad (7.1.42)$$

где k_ω – решение уравнения $\text{Re}\varepsilon(k, \omega) = 0$. Оценим вклад $\nu_{p1}(\omega)$ вблизи области порога включения механизма экранирования плазменными колебаниями, т. е. в длинноволновом пределе спектральной чувствительности. В этом случае имеем (ICHIMARU, 1973):

$$\text{Re}\varepsilon(k, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{2\bar{\varepsilon}}{m} \frac{k^2}{\omega^2} \right), \quad (7.1.43)$$

где $\bar{\varepsilon}$ – средняя энергия, приходящаяся на один электрон

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} m v_F^2 \left[\frac{T}{E_F} \right]^{5/3} I_{3/2} \left(\frac{\mu}{T} \right), \quad (7.1.44)$$

определяется функцией Ферми-Дирака порядка $3/2$. Следовательно, в длинноволновом приближении получим:

$$\nu_{p1}(\omega) = \frac{2}{3} S(0) Z_i \omega_p^{3/2} \frac{(\omega - \omega_0)^{1/2}}{4\epsilon^{3/2}}, \quad \omega - \omega_p \leq \omega_p. \quad (7.1.45)$$

Из данного уравнения следует, что с точностью до кулоновского логарифма, зависимость $\nu_{p1}(\omega)$ и $\nu_{ef}(\omega)$ от таких параметров плазмы, как Z_i , n_i , n , T , одинакова. При $(\omega - \omega_p) \approx \omega_p$ поправки к частоте столкновений, обусловленные плазменными колебаниями, имеют тот же порядок, что и сама частота столкновений. Надо однако отметить, что в этом частотном диапазоне иногда возникает необходимость учесть также переходы из состояний дискретного спектра.

7.2. Теоретический подход к расчету непрозрачностей в плазме

В условиях интенсивного энерговыделения благодаря мощным потокам энергии температура вещества может резко повышаться до нескольких МэВ, поэтому в процессах переноса энергии большую роль играет излучение. По этой причине появляется необходимость расчета коэффициентов поглощения электромагнитного излучения в широком диапазоне температур и плотностей.

Первая попытка вычисления коэффициентов непрозрачности плотной нагретой воды относится к физике звездных недр (COX, 1965; CARSON et al., 1968; НИКИФОРОВ, УВАРОВ, 1970). В этих работах исследовались различные механизмы поглощения электромагнитного излучения. Непрерывный спектр поглощения связан с тормозным механизмом (свободно-свободные переходы) и фотоионизации (связанно-свободные переходы). В вышеупомянутых работах показано, что дискретный спектр излучения (связанно-связанные переходы) оказывает существенное влияние на длину свободного пробега фотона.

Звездное вещество состоит, главным образом, из легких элементов, а концентрация тяжелых элементов очень мала. Тем не менее, в настоящее время ведутся широкие исследования плазмы тяжелых элементов при воздействии на нее лазерными, электронными и ионными пучками.

Расчет коэффициентов поглощения производится в несколько этапов. Во-первых, необходимо знать точный состав плазмы, принимая во внимание огромное разнообразие возбужденных состояний различных ионов.

Во-вторых, необходимо знать энергии электронных переходов и соответствующие силы осцилляторов для каждой из многочисленных компонент плазмы. В-третьих, надо оценить форму каждой спектральной линии вследствие разных механизмов уширения (эффектов Штарка, Допплера, естественного уширения спектральных линий). При сравнительно низких температурах, когда преобладают многоэлектронные оболочки (N, O, \dots), количество спектральных линий, которые необходимо принять во внимание в плазме тяжелых элементов, достигает нескольких тысяч. Именно поэтому вычислительный процесс расчета коэффициентов поглощения достаточно трудоемок (НИКИФОРОВ и др., 1982).

Упрощенный подход основан на приближении среднего атома (CARSON et al., 1968; НИКИФОРОВ, УВАРОВ, 1970; ROZSNYAI, 1973). В рамках данного приближения расчет энергий одноэлектронных состояний производится с использованием чисел заполнения каждого состояния, имеющих нецелочисленные значения и определяющихся согласно распределению Ферми-Дирака.

В модели среднего атома одному одноэлектронному переходу соответствует одна конкретная линия. В реальной плазме данный одноэлектронный переход может осуществляться в различных компонентах плазмы, поэтому ему будет соответствовать не одна линия, а группа линий. Задача описания подобного спектра очень сложна. Однако, существует метод, который позволяет без каких бы то ни было трудностей выйти за рамки приближения среднего атома. Если известны средние значения чисел заполнения каждого электронного состояния, можно рассчитать флуктуации чисел заполнения. При определенных предположениях флуктуации будут подчиняться биномиальному распределению, которое будет определяться двумя параметрами: максимально возможным числом заполнения данного одноэлектронного состояния и его средним значением (CARSON et al., 1968, ДРАГАЛОВ и др., 1988). Дальнейшее упрощение связано с предположением, что линии, соответствующие идентичным электронным переходам сильно перекрываются. На этом основании можно ввести в модель усредненного атома понятие функции, описывающей форму линии, при этом ширина линии будет определяться не только физическими механизмами, но также и величиной флуктуаций чисел заполнения (SHALITIN et al., 1984; STEIN et al., 1985; ДРАГАЛОВ, НОВИКОВ, 1987; ДРАГАЛОВ и др., 1987). Рассматриваемые модели основаны на квантово-механическом подходе и предполагают расчет волновых функций и соответствующих матричных элементов.

Полуэмпирическая модель среднего атома (см. раздел 6.2) может также служить для расчета коэффициентов поглощения (TSAKIRIS and EIDMAN, 1987). В рамках данной теории числа заполнения водородных состояний

определяются не из квантово-механических расчетов, а термодинамическим расчетом с использованием полуэмпирических констант экранирования (MORE, 1982). Водородоподобное приближение используется для оценки сил осцилляторов электронных переходов.

Описание спектра в этом случае оказывается недостаточно качественным, поскольку в нем не учитывается эффект расщепления электронных энергетических уровней по орбитальному моменту l , мультиплетное расщепление, а также существование нескольких компонент плазмы, характеризующихся разным количеством связанных электронов и их распределением по электронным оболочкам. С целью преодоления данного недостатка был предложен следующий алгоритм (TSAKIRIS and EIDMAN, 1987). Совокупность спектральных линий, соответствующих переходам из состояния с главным квантовым числом n на более высокие энергетические уровни, заменяется на энергетическую зону, ширина которой равна минимальному значению энергии возбуждения, и соответствующей плотностью сил осцилляторов. Этого, однако, недостаточно для корректного описания росселандовых пробегов излучения. Чтобы преодолеть данный недостаток, авторы метода предложили следующую дополнительную феноменологическую процедуру. Полученный коэффициент «связанно-связанного» поглощения размазывается согласно гауссовому распределению с шириной ΔE . Физический смысл данной процедуры следующий: реальные энергетические уровни многоэлектронного атома или иона расщепляются в энергетические зоны с шириной, сравнимой с расстоянием между уровнями. По этой причине «области пропускания» между зонами также частично заполняются локализованными уровнями. Считается, что параметр ΔE не зависит от температуры и плотности, а его значение для каждого элемента выбирается таким образом, чтобы он соответствовал коэффициентам непрозрачности по Росселанду и Планку, содержащимся в банке данных SESAME (1983).

Теперь рассмотрим наиболее простую модель расчета непрозрачности плазмы (РАЙЗЕР, 1959b; ARMSTRONG and NICHOLLS, 1972; ИМШЕНИК и др., 1986). Райзер вывел приближенную формулу, описывающую непрерывное поглощение в области многократной ионизации, которая строится на оценке ионизационного равновесия (РАЙЗЕР, 1959a). Армстронг и Николс получили верхнюю границу коэффициента непрозрачности по Росселанду κ_{\max} , из условия экстремума Росселандовой длины пробега при ограничении, налагаемом квантовомеханическим правилом сумм,

$$\kappa_{\max} = \frac{Z}{A} 6,02 \cdot 10^3 / T. \quad (7.2.1)$$

Здесь Z — количество электронов в атоме с атомным весом A , κ_{\max} измеряется в $\text{см}^2 \text{г}^{-1}$, а температура T — в кэВ.

В рамках аналогичного подхода ИМШЕНИК и др., 1986 оценил минимальную величину росселандова пробега, но правило сумм применялось исключительно к связанным электронам. В этом случае параметр Z в уравнении (7.2.1) заменяется на Z_i , а основной вклад в значение коэффициента непрозрачности по Росселанду обусловлен связанно-связанными переходами.

Из всего вышесказанного следует, что энергетические уровни электронов в плотной нагретой плазме расположены близко друг к другу и, следовательно, подобный спектр можно вполне корректно описать квазиклассическим приближением (ПОЛИЦУК и др., 1990). Суть данного подхода заключается в делении вещества на отдельные части, в каждой из которых плотность электронов можно считать постоянной, меняющейся от области к области. Все физические свойства, описывающие вещество как единое целое, рассчитываются путем интегрирования соответствующих значений по локальным областям. Данный подход хорошо нам известен по ячеечной модели Томаса–Ферми, где он применялся, в частности, для расчета термодинамических свойств вещества (КИРЖНИЦ et al., 1975). Полицук и др. (ПОЛИЦУК и др., 1990) разработали обобщенный подход для расчета длины пробега фотона в веществе, речь о нем пойдет в следующем разделе. Также мы сравним результаты эксперимента и расчета на основе этого и других подходов, сделаем соответствующие выводы.

7.3. Непрозрачности плазмы. Полуэмпирический подход

В данном разделе мы рассмотрим широкодиапазонную модель расчета радиационной длины свободного пробега в плазме. Основным параметром модели является распределение электронной плотности по ячейке Вигнера–Зейтца с зарядом ядра Z (ядро расположено в центре ячейки). Профиль электронной плотности $n(r)$, который зависит от температуры и плотности плазмы, строится на основе метода функционала плотности в градиентном представлении (раздел 6.1). Распределение плотности связанных электронов в составе иона $n(r)$ определяется из уравнения (6.1.33), а средний заряд иона Z_i равен:

$$Z_i = Z - \int_{v_0} n_b(r) dr. \quad (7.3.1)$$

Уравнение (7.3.1) характеризует состояние умеренной ионизации. Характеристическая длина пробега $l(\omega)$ и коэффициент непрозрачности $\chi(\omega)$ опре-

деляются спектральным коэффициентом поглощения света $\eta(\omega)$:

$$l(\omega) = \frac{1}{\eta(\omega)}, \quad (7.3.2)$$

$$\kappa(\omega) = \frac{\eta(\omega)}{\rho}, \quad (7.3.3)$$

где ρ — массовая плотность вещества. Следующие соотношения (ЗЕЛЬДОВИЧ, РАЙЗЕР, 1966) служат для расчета эффективных длин пробега в оптически толстой плазме l_R (Росселан/л) и оптически тонкой плазме l_P (Планк):

$$l_R = \int_0^{\infty} l(\omega) G_R(u) du, \quad (7.3.4)$$

$$l_P^{-1} = \int_0^{\infty} l^{-1}(\omega) G_P(u) du,$$

где $u = \omega/T$ (T — температура) и

$$G_R(u) = \frac{15}{4\pi^4} \frac{u^4 e^{-u}}{(1 - e^{-u})^2}, \quad G_P(u) = \frac{15}{\pi^4} \frac{u^3}{e^u - 1}. \quad (7.3.5)$$

Спектральный коэффициент поглощения $\eta(\omega)$ в случае электромагнитного излучения с частотой ω равен отношению энергетических потерь в единице объема Q к вектору Пойнтинга S и может быть выражен через динамическую диэлектрическую проницаемость:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon' + i\varepsilon'',$$

$$\eta(\omega) = \frac{\omega^2 \varepsilon''(\omega)}{c^2 k'(\omega)}, \quad (7.3.6)$$

где c — скорость света в вакууме, k' — волновой вектор, определяемый согласно уравнению:

$$k'(\omega) + ik''(\omega) = \frac{\omega}{c} \varepsilon(\omega)^{1/2}. \quad (7.3.7)$$

Выразим диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$ с учетом разделения электронов на свободные и связанные:

$$\varepsilon(\omega) - 1 = 4\pi n_i \alpha_i(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\nu_{ef}(\omega)}, \quad (7.3.8)$$

где ω_p — частота собственных колебаний свободных электронов в плазме, $\nu_{ef}(\omega)$ — динамическая частота столкновений свободных электронов с ионами, $\alpha_i(\omega)$ — динамическая поляризуемость связанных электронов, n_i — плотность числа ионов.

Полищук (ПОЛИЩУК, 1989a,b) вывел интерполяционную формулу для расчета динамической частоты столкновений $\nu_{ef}(\omega)$. Она применима для случаев произвольного вырождения электронного газа, классического и квантового рассеяния, произвольного соотношения между частотой поглощаемого излучения и электронной плазменной частотой. Также она учитывает влияние индуцированного излучения. В разделе 7.1 мы приводили данное выражение (уравнение (7.1.30)) и обсуждали проблемы, связанные с его применением. Функция распределения плотности связанных электронов в составе иона $n_b(r)$ позволяет рассчитать динамическую поляризуемость $\alpha_i(\omega)$ иона в приближении локальной плотности:

$$\alpha_i(\omega) = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} dr n_b(r) \alpha(\omega, n_b(r)), \quad (7.3.9)$$

где $\alpha(\omega, n_b)$ — динамическая поляризуемость ячейки Вигнера-Зейтца, заполненной однородным электронным газом с плотностью n_b . Чтобы вычислить $\alpha(\omega, n_b)$, рассмотрим однородную систему электронов в переменном внешнем поле $E \cos(\omega t)$, описываемую гамильтонианом взаимодействия

$$V = -(D, E) \cos \omega t, \quad (7.3.10)$$

где D — оператор дипольного момента:

$$D = \sum_n r_n. \quad (7.3.11)$$

Суммирование производится по всем электронам. С учетом уравнения (7.3.11) и «золотого правила» квантовой механики для вычисления расчета вероятностей перехода (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1982) приходим к следующему выражению для поглощенной многоэлектронной системой мощности $P_i^a(\omega)$ при переходе системы из начального состояния i в любое возможное конечное состояние f ,

$$P_i^a(\omega) = \frac{\pi E^2}{2} \sum_f |\langle f | \sum_n r_n s | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}) \omega_{fi}. \quad (7.3.12)$$

Здесь ω_{fi} — разность значений энергии конечного и начального состояний, s — единичный вектор в направлении E .

С учетом тождества $rs = q^{-1}(qrs)$ уравнение (7.3.12) сводится к виду:

$$P_i^a(\omega) = \frac{\pi E^2}{2} v_0^2 \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_f |\langle f | \rho(q) | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}) \omega_{fi}, \quad (7.3.13)$$

где $\rho(q)$ — преобразование Фурье для оператора плотности частиц.

Если необходимо вычислить полную мощность $P^a(\omega)$, поглощенную системой на частоте ω при температуре $1/\beta$, мы должны записать:

$$P^a(\omega) = \sum_i P_i^a(\omega) e^{-\beta(E_i - F)}, \quad (7.3.14)$$

где E_i — спектр возбуждения, F — свободная энергия системы.

Зная значение динамического структурного фактора $S(q, \omega)$ (СНМА-РУ, 1973), получаем:

$$P^a(\omega) = \frac{\pi E^2}{2} v_0 \frac{1}{1 + \exp(-\beta\omega)} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} S(q, \omega). \quad (7.3.15)$$

Мощность индуцированного излучения $P^e(\omega)$ получается аналогично:

$$P^e(\omega) = -P^a(-\omega). \quad (7.3.16)$$

Учитывая симметрию структурного фактора, находим поглощенную мощность $P_{ef}(\omega)$:

$$P_{ef}(\omega) = P^a(\omega) - P^e(\omega) = \pi E^2 v_0 \omega \times \left[\frac{1}{1 + \exp(-\beta\omega)} - \frac{1}{1 + \exp(\beta\omega)} \right] \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} S(q, \omega). \quad (7.3.17)$$

Уравнения (7.3.15) и (7.3.17) являются обобщением результатов Брандта и Лундквиста (BRANDT and LUNDQVIST, 1965), а также Брандта и др. (BRANDT et al., 1967) для произвольной температуры. Они удовлетворяют следующему соотношению:

$$P_{ef}(\omega) = P^a(\omega)(1 - e^{-\beta\omega}). \quad (7.3.18)$$

Если выразить уравнение (7.3.17) через параметр диэлектрической проницаемости $\varepsilon(q, \omega)$, поглощенная мощность перестает явно зависеть от температуры:

$$P_{ef}(\omega) = \frac{\omega}{8\pi} E^2 v_0 \lim_{q \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)}. \quad (7.3.19)$$

Мнимая часть диэлектрической поляризуемости $\alpha_i(\omega)$ равна:

$$\text{Im}\alpha(\omega) = -\frac{v_0}{4\pi} \lim_{q \rightarrow 0} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)}. \quad (7.3.20)$$

Действительную часть поляризуемости можно восстановить из дисперсионного соотношения:

$$\text{Re}\alpha(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}\alpha(z)}{z - \omega} dz. \quad (7.3.21)$$

Учитывая, что при $q \rightarrow 0$ $\varepsilon(q, \omega) \rightarrow 1 - \omega_p^2/\omega^2$, на основе уравнений (7.3.20) и (7.3.21) придем к следующей зависимости $\alpha(\omega)$ от плотности электронов n_b :

$$\alpha(\omega, n_b) = \frac{n_b v_0}{4\pi n_b - \omega^2 - i\omega_0}. \quad (7.3.22)$$

Динамическая поляризуемость иона в приближении локальной плотности равна:

$$\alpha_i(\omega) = \int_{v_0}^{\infty} dr \frac{n_b(r)}{4\pi n_b(r) - \omega^2 - i\omega_0}. \quad (7.3.23)$$

В рамках данного приближения уравнение (7.3.23) оказывается применимым для произвольной температуры, также в нем учитывается эффект индустрированного излучения.

Теперь сравним результаты расчета радиационных пробегов на основе приближения локальной плотности с экспериментальными данными, а также с результатами расчета другими методами. Описание методов расчета радиационных пробегов в плотной нагретой плазме содержится в книге ROZSNYAI (1980). Как и в случае применения сложных квантово-статистических моделей по типу Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) (ROZSNYAI, 1972, 1982; MAGI et al., 1975), значения полученных на основе разных моделей результатов могут отличаться в 4-5 раз. Соответствие результатов различных расчетов радиационных пробегов в данных пределах достаточно хорошее. На рис. 7.3.1 показана зависимость росселандовой длины пробега в плазме алюминия плотностью 0.5 г/см^{-3} от температуры. Графики построены на основе нескольких моделей: метода Хартри-Фока-Слэтера в приближении среднего атома (АХФС) (НИКИФОРОВ и др., 1975), ионного метода Хартри-Фока-Слэтера для расчета состава плазмы (ИХФС) (НИКИФОРОВ

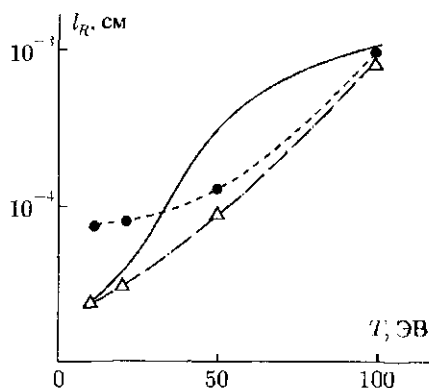


Рис. 7.3.1. Зависимость росселандовой длины пробега фотонов l_R в плазме алюминия от температуры T при плотности $\rho = 0,5 \text{ г см}^{-3}$. Пунктирная линия — АХФС, штрихпунктирная линия — ИХФС, сплошная линия — ЛПЭ (см. пояснения в тексте)

и др., 1982), приближения локальной плотности электронов (ЛПЭ) (ПОЛИЩУК и др., 1990). Самые точные результаты достигаются с помощью метода АХФС, близкими к ним являются результаты расчета в приближении ЛПЭ. Расчетные значения, полученные на основе приближения ЛПЭ и метода АХФС, могут отличаться друг от друга в три раза.

На рис. 7.3.2 представлены результаты расчета росселандова коэффициента непрозрачности в рамках модели ЛПЭ на примере плазмы золота в сравнении с результатами, достигнутыми Цакирисом и Эйдманом (TSAKIRIS and EIDMAN, 1987). Также на рисунке показаны результаты, полученные Драгаловым и др. (ДРАГАЛОВ и др., 1988), но пересчитанные для заданного значения плотности и «минимальной оценки» росселандова пробега. На рис. 7.3.3 изображены аналогичные графики для коэффициента непрозрачности по Планку плазмы золота. Сравнение результатов расчета коэффициента непрозрачности по Росселанду для плазмы алюминия по модели ЛПЭ с соответствующими значениями из банка данных SESAME (1983) представлено на рис. 7.3.4. Видно, что модель ЛПЭ (ПОЛИЩУК и др., 1990) согласуется лучше, нежели «минимальная оценка» (ИМПЕННИК и др., 1986), с более строгими расчетами (SESAME, 1983; ДРАГАЛОВ и др., 1988).

На рисунках 7.3.2 и 7.3.4 цифрами обозначены средние заряды ионов. Видно, что рассматриваемый диапазон температур включает как области низкой ионизации, так и область почти полной ионизации. Принимая во

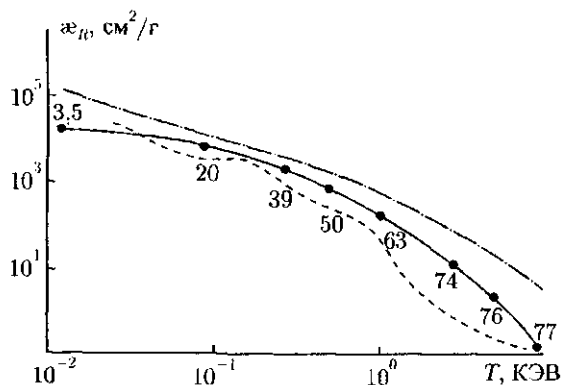


Рис. 7.3.2. Зависимость коэффициента непрозрачности по Росселанду χ_R ($\text{см}^2 \text{г}^{-1}$) плазмы золота от температуры T при плотности $\rho = 0,1 \text{ г см}^{-3}$. Сплошная линия — модель ЛПЭ (ПОЛИЩУК и др., 1990; ПОЛИЩУК, ХЛОПОНИН, 1990), пунктирная линия — TSAKIRIS and EIDMAN (1987), штрихпунктирная линия — ИМШЕННИК и др. (1986). Цифрами обозначен средний заряд тяжелых частиц

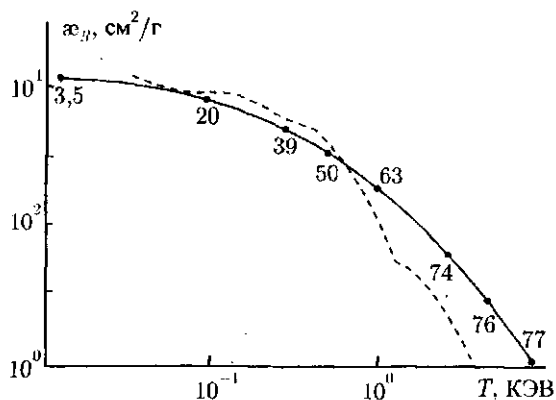


Рис. 7.3.3. Зависимость планковского коэффициента непрозрачности χ_P плазмы золота от температуры T при $\rho = 0,1 \text{ г см}^{-3}$. Пояснения к условным обозначениям как и на рис. 7.3.2

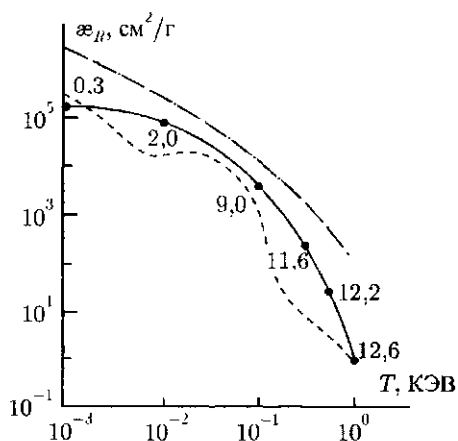


Рис. 7.3.4. Зависимость планковского коэффициента непрозрачности χ_P плазмы алюминия от температуры T при $\rho = 0,1 \text{ г см}^{-3}$. Пояснения к условным обозначениям как и на рис. 7.3.2

внимание классические принципы, лежащие в основе модели ЛПЭ, можно ожидать, что она окажется неприменимой в случае очень высокой степени ионизации, когда квантовые числа электронов, дающих основной вклад в поглощение становятся малыми. По отношению к полному числу электронов в атоме алюминия такая ситуация соответствует температуре 10^3 эВ, а в случае плазмы золота — 10^4 эВ. Тем не менее, при высоких температурах, когда плазма полностью ионизована, приближение ЛПЭ по-прежнему применимо.

Экспериментальных исследований, направленных на изучение радиационных пробегов в горячей плотной плазме многоэлектронных элементов, существует немного. В частности, известны результаты (ЕЛИСЕЕВ и др., 1986) измерения времени прохождения тепловой волны в металле в условиях интенсивного энерговыделения. Скорость распространения тепловой волны зависит от длины свободного росселандова пробега фотонов. Математическое моделирование проведенных опытов позволяет рассчитать росселандов коэффициент непрозрачности. К сожалению, авторы данного исследования представили не абсолютные значения коэффициента непрозрачности по Росселанду, полученные экспериментальным путем, а их соотношение для ряда легких и тяжелых элементов: углерода (С), алюминия (Al), железа (Fe), свинца (Pb) — плотностью 1 г/см^3 и температурой 300 эВ.

На рис. 7.3.5 показаны результаты описанных экспериментов в сравнении с нашими расчетными данными. Видно, что они достаточно близки друг к другу. Результаты расчета для легких элементов в высокоионизированном состоянии могут отличаться от экспериментальных в три раза.

В работе (ВОДОЛАГА, 1990) опубликованы результаты измерений ресселандова пробега фотонов в плазме алюминия. Условия эксперимента были близки к условиям вышеописанного эксперимента (ЕЛИСЕЕВ и др., 1986), но они затронули область гораздо более высокой температуры: $T = 5 \cdot 10^2 - 2 \cdot 10^3$ эВ.

На рис. 7.3.6 показаны результаты данных экспериментов в сравнении с полученными в приближении ЛПЭ данными по длине свободного пробега фотонов по Росселанду. Они достаточно близки друг к другу, максимальное отклонение опять-таки соответствует множителю 3.

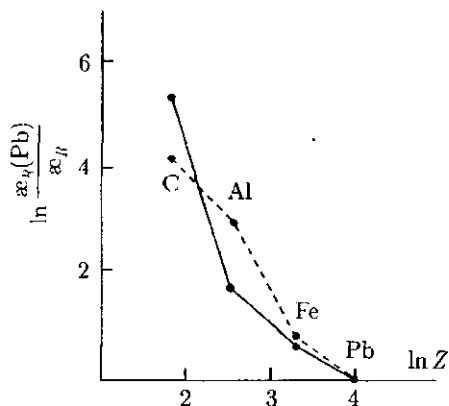


Рис. 7.3.5. Коэффициент непрозрачности по Росселанду χ_R для C, Al, Fe, Pb, полученный экспериментальным путем (ЕЛИСЕЕВ и др., 1986) (пунктирная линия) и рассчитанный в приближении ЛПЭ (НОЛИЦУК и др., 1990) (сплошная линия). Плотность $\rho = 18 \text{ г см}^{-3}$, температура $T = 0,3 \text{ кэВ}$ для всех веществ

7.4. Теория пробегов быстрых ионов в плазме металлов

Тормозную способность однородного электронного газа можно выразить через диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(q, \omega)$. Пусть E — энергия

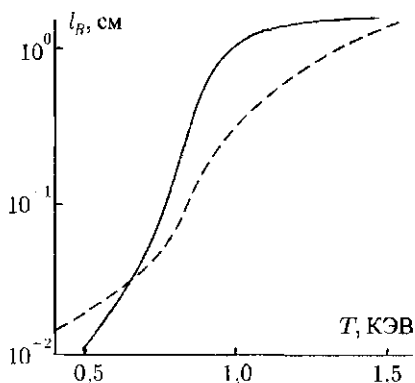


Рис. 7.3.6. Зависимость росселандовой длины пробега l_R от температуры в алюминиевой плазме плотностью $\rho = 1 \text{ г см}^{-3}$. Сплошная линия — модель ЛПЭ (ПОЛИЩУК и др., 1990). Пунктирная линия — экспериментальные данные (ВОДОЛАГА, 1990)

иона, v — его скорость, Z — заряд иона, x — координата в направлении движения. Получаем (ICHIMARU, 1973):

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2}{\pi} \frac{Z^2}{v^2} \int_0^\infty \frac{dq}{q} \int_0^{qV} d\omega \omega \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right). \quad (7.4.1)$$

Если $v \ll v_e$ (v_e — характерная скорость электрона), при интегрировании можно использовать низкочастотное приближение для мнимой части диэлектрической проницаемости (ARISTA and BRANDT, 1984):

$$\begin{aligned} \varepsilon''(q, \omega) &= 2\omega \frac{f(q)}{q^3}, \\ f(q) &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{q^2}{2T} - \beta\mu\right)}, \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

где T — температура, $\beta = 1/T$, μ — химический потенциал электронов. Функция $f(q)$ обеспечивает сходимость интеграла в верхнем пределе

для q . Если действительную часть диэлектрической проницаемости ε принять равной единице, интеграл (7.4.1) будет расходиться в нижнем пределе по q . Отсюда следует, что основной вклад в значение интеграла обеспечивается длинноволновой областью, а для действительной части значения $\varepsilon(q, \omega)$ можно воспользоваться следующим приближением:

$$\varepsilon'(q) = 1 + \frac{1}{d^2 q^2}, \quad (7.4.3)$$

где d — электронный дебаевский радиус экранирования. Чтобы вычислить интеграл (7.4.1), подставим в формулу для $f(q)$ значение $q = 0$ и введем при интегрировании по q обрезанный импульс $1/b_{\min}^q$. В результате получим:

$$-\frac{dE}{dx} = F_f = \frac{4\pi n^2}{v^2} g(v) \ln \Lambda, \quad (7.4.4)$$

где $g(v) = (v/v_F)^3 [1 + \exp(-\beta\mu)]^{-1}$ — относительная доля электронов, скорость которых меньше v ,

$$\ln \Lambda = \frac{1}{2} \left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{d}{b_{\min}^q} \right)^2 \right] + \frac{d^2}{d^2 + (b_{\min}^q)^2} \right\}. \quad (7.4.5)$$

Данное уравнение соответствует борновскому приближению. Величину b_{\min}^q можно найти путем сравнения выражения (7.4.5) с асимптотическими результатами, полученными для бальцмановской (ARISTA and BRANDT, 1981; GEORGE et al., 1979) и вырожденной плазмы (FERMI and TELLER, 1947). Данные результаты можно сплить, если ввести понятие характерной скорости электронов v_e ,

$$v_e^2 = 2 \left(E_f + \frac{3}{2e\Gamma} T^2 \right)^{1/2}, \quad (7.4.6)$$

где e — основание натурального логарифма, $\Gamma = 1,78$, E_f — энергия Ферми для электронов, и учесть соотношение

$$b_{\min}^q = \frac{1}{2v_e}, \quad (7.4.7)$$

соответствующее выражению для дебройлевской длины волны электронов с энергией $E_e = mv_e^2/2$. Обратим внимание, что соотношение (7.4.7) полностью совпадает с выражением $b_{\min}^a = (8E_e)^{-1/2}$, которые мы использовали в разделе 6.5 для расчета статической и динамической проводимости.

В вышеупомянутых работах (ARISTA and BRANDT, 1981; GEORGE et al., 1979; FERMI and TELLER, 1947) рассматривался лишь случай $d \gg b_{\min}^q$. Формула (7.4.5), напротив, позволяет производить расчеты для любых соотношений между d и b_{\min}^q . Для дальнейшего ее можно заменить численно близким, но более простым выражением с такими же асимптотиками при $d \gg b_{\min}^q$ и $d \ll b_{\min}^q$:

$$\ln \Lambda = \frac{1}{4} \left[1 + \left(\frac{b_{\max}}{b_{\min}} \right)^4 \right], \quad (7.4.8)$$

где $b_{\max} = d$, а $b_{\min} = b_{\min}^q$. Отметим соответствие этого выражения для кулоновского логарифма с аналогичной величиной для проводимости (см. раздел 6.5). Справедливость интерполяционной формулы (7.4.8) подтверждена экспериментальными исследованиями. Для классического рассеяния необходимо изменить значение параметра b_{\min} , фигурирующего в уравнении (7.4.8). Следуя работе (KIHARA and AONO, 1963), где рассмотрен случай $d \gg b_{\min}$ необходимо, для b_{\min} положить:

$$b_{\min} = b_{\min}^c = \frac{3\Gamma \bar{Z}}{4E v_e^2}, \quad (7.4.9)$$

что соответствует расстоянию «наибольшего сближения» при классическом рассеянии.

Теперь рассмотрим другой предельный случай, когда $v \gg v_e$. Относительная доля электронов, скорость которых меньше v , равна $g(v) \approx 1$. Уравнение (7.4.1) сохраняет ту же форму, и лишь выражение для кулоновского логарифма меняется. Поскольку характерная частота столкновений определяется параметром v , кулоновский логарифм перестает зависеть как от v_e , так и от степени вырождения. Структура уравнения (7.4.8) остается прежней, но фигурирующие в нем параметры будут иметь иной физический смысл: характеристический радиус экранирования $b_{\max} = d = v_e/\omega_p$ при $v \gg v_e$ заменяется выражением $b_{\max} = v/\omega_p$. Характерный импульс $q \approx \omega_p/v$ удовлетворяет условию $qd \ll 1$ и соответствует возбуждению вследствие плазменных колебаний. Согласно асимптотике, полученной Бором (BOHR, 1913; AHLEN, 1980) для случая классического рассеяния, а также результатам, полученным другими исследователями (LINDHARDT and WINTER, 1964; MAYNARD and DEUTSCH, 1982; ARISTA and PIRIZ, 1987) для случая квантового рассеяния, и учитывая выражение для b_{\max} , значение b_{\min} будет иметь для данных предельных случаев следующие значения: $\Gamma \bar{Z}/2v^2$ и $1/2v$, соответственно.

Проведенный выше анализ позволяет предложить универсальную интерполяционную формулу для тормозной способности электронного газа (ПОЛИЩУК и др., 1959). Уравнение (7.4.4) будет иметь ту же структуру в случае, когда используются следующие соотношения:

$$g(v) = \left[1 + \phi(\mu) \left(\frac{v_F}{v} \right)^3 \right]^{-1} \quad (7.4.10)$$

$$\phi(\mu) = 1 + \exp \left(-\frac{\mu}{T} \right).$$

Выражение для кулоновского логарифма (7.4.8) справедливо при следующих определениях:

$$b_{\max} = \frac{v_{ef}}{\omega}, \quad b_{\min} = \max[\lambda, l],$$

$$\lambda = \frac{1}{2v_r}, \quad l = \frac{\Gamma \bar{Z}}{2v_r^2},$$

$$v_{ef} = \max \left[v, v_e \left(\frac{\Gamma}{6e} \right)^{1/4} \right], \quad (7.4.11)$$

$$v_r = \max \left[v, v_e \left(\frac{2e}{3\Gamma} \right)^{1/4} \right].$$

Баско (БАСКО, 1984) вывел свои интерполяционные формулы для оценки тормозной способности однородного электронного газа. К сожалению, эти формулы удовлетворяют известным асимптотическим соотношениям только с логарифмической точностью, также она не затрагивает случай квантового рассеяния. Рассмотренная нами формула (ПОЛИЩУК и др., 1989) свободна от таких недостатков. Диелектрический формализм позволяет более корректно описать промежуточную область частичного вырождения плазмы, нежели интерполяционная формула Баско.

7.5. Полуэмпирическая модель тормозной способности плазмы

В предыдущем разделе речь шла о тормозной способности электронной плазмы. В реальной плазме, помимо свободных электронов, содержатся связанные электроны, локализованные в тяжелых частицах. В данном

разделе мы рассмотрим влияние этих частиц на тормозную способность плазмы в рамках широкодиапазонных методов расчета. Особое внимание уделим сравнению результатов расчета с экспериментальными данными.

Движущаяся в среде частица с зарядом Z может сталкиваться с окружающими ее частицами и передавать им часть своей кинетической энергии, которую она теряет под воздействием эффективной силы трения. Термин «столкновение» применяется в широком смысле и подразумевает также процессы возбуждения внутренних степеней свободы окружающих частиц и коллективные степени свободы, такие как плазменные волны.

Вследствие кулоновского характера взаимодействия тормозная способность плазмы определяется, главным образом, вкладом электронов. Действительно, при однократном столкновении с электроном, находящимся в состоянии покоя, быстрый ион теряет энергию ΔE ; σ — характерное сечение данного процесса. На ион действует сила торможения, равная:

$$F_e \approx \Delta E \sigma n, \quad (7.5.1)$$

где n — плотность числа электронов. Пусть b — прицельное расстояние. При столкновении электрона и иона, имеющего скорость v , на электрон воздействует характерная сила $f \approx \bar{Z}b^{-2}$ в течение интервала времени $\tau = b/v$. Переданный импульс Δp будет равен $f\tau \approx \bar{Z}/bv$, и, следовательно, значение переданной энергии $\Delta E(b)$ будет иметь порядок $\bar{Z}^2 b^{-2} v^{-2} m$ (m — масса электрона). Получаем,

$$\Delta E \sigma = \int db b \frac{\bar{Z}^2}{b^2 v^2 m} \approx \frac{\bar{Z}^2}{v^2 m} \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} \frac{db}{b} \approx \frac{\bar{Z}^2}{v^2 m} \ln \Lambda, \quad (7.5.2)$$

$$F_e \approx \frac{\bar{Z}^2 n}{v^2 m} \ln \Lambda,$$

где фигурируют минимальное и максимальное значения прицельного расстояния, а также кулоновский логарифм.

При столкновении налетающего иона с ионом среды (имеющим для простоты такую же массу и единичный заряд) переданная энергия будет равна $\approx Mv^2$, а сечение столкновения $\bar{Z}^2/(Mv^2)^2$, так что соответствующая составляющая силы торможения будет следующей:

$$F_i \approx \frac{\bar{Z}^2 n_i}{v^2 M} \ln \Lambda, \quad (7.5.3)$$

где n_i — плотность числа ионов среды. Принимая во внимание условие электронейтральности ($n_i = n$), получаем:

$$\frac{F_i}{F_e} \approx \frac{m}{M} \ll 1. \quad (7.5.4)$$

Характер столкновений налетающих ионов, движущихся с достаточно высокой скоростью, со свободными и связанными электронами отличаться не будет. Уравнение (7.5.2) сохраняет ту же форму, в случае связанных электронов меняется лишь выражение для кулоновского логарифма (см. ниже). Таким образом, как свободные, так и связанные электроны играют существенную роль при торможении быстрых ионов.

Рассмотрим тормозную способность связанных электронов. Очевидно, что в том случае, когда скорость ионов значительно превышает скорость атомных электронов, характер столкновений иона со связанными и свободными электронами будет одинаковым. Таким образом, тормозная способность будет определяться следующим выражением:

$$F_b \approx \frac{\bar{Z}^2 n_b}{v^2} \ln \frac{b_{\max}^b}{b_{\min}^b}, \quad (7.5.5)$$

где n_b — плотность связанных электронов и

$$b_{\min}^b = \max \left[\frac{1}{2v}, \frac{\Gamma \bar{Z}}{2v^2} \right],$$

что соответствует выражению (7.4.11). Физический смысл параметра b_{\min}^b состоит в том, что он определяет прицельное расстояние для столкновений, которые влекут за собой возбуждение внутренних степеней свободы. Характерное время столкновения приблизительно равняется b_{\max}^b/v . При условии $\tau \approx 1/\bar{\omega}$ столкновение может привести к переходу с энергией $\hbar\bar{\omega}$ в атоме. Тогда $b_{\max}^b \approx v/\bar{\omega}$. Сравнивая этот результат с уравнением (7.4.11), приходим к заключению, что плазменная частота для свободных электронов заменяется характерной частотой электронных переходов $\bar{\omega}$, которая имеет тот же порядок, что и потенциал ионизации. Уравнение (7.5.3) применимо в том случае, когда области ближних и дальних столкновений разделены, т. е. $b_{\max}^b \gg b_{\min}^b$. Такая ситуация характерна для больших скоростей v . Если налетающие ионы движутся с низкой скоростью, характер столкновений будет адиабатическим. В терминах классической механики можно сказать, что в течение медленного столкновения связанный электрон успева-

несколько раз обойти вокруг ядра, так что работа внешней силы, воздействующей на него, будет экспоненциально мала (КУМАХОВ, КОМАРОВ, 1979),

$$F_b = \frac{\bar{Z}^2 n_b}{v^2} \gamma \exp\left(-\frac{2}{\xi}\right), \quad \xi = \frac{b_{\max}^b}{b_{\min}^b}, \quad (7.5.6)$$

где значение константы γ определяется выбором конкретной модели или устанавливается из эксперимента. Уравнения (7.5.3) и (7.5.4) (для быстрых и медленных столкновений, соответственно) можно объединить в единую формулу (БЕСПАЛОВ и др., 1989):

$$F_b = \frac{4\pi \bar{Z}^2 n_b}{v^2} \ln \Lambda(\xi), \quad (7.5.7)$$

$$\ln \Lambda(\xi) = \ln \left[1 + \frac{\xi}{1 + \frac{\gamma \xi \exp\left(\frac{2}{3}\right)}{1 + \xi^2}} \right].$$

По мере замедления иона в среде, связанные электроны постепенно перестают участвовать в процессе торможения, что видно из уравнения (7.5.7). Необходимо учитывать, что электроны, расположенные на более низких орбитах, характеризуются более высокими частотами переходов и, соответственно будут исключаться из процесса торможения на более ранних стадиях. Чтобы принять это во внимание, Баско (БАСКО, 1984) ввел понятие кулоновского логарифма для каждой электронной оболочки атома (иона):

$$\ln \Lambda = \sum_{k=1}^{k_{\max}} n_k \ln \Lambda(\xi_k), \quad (7.5.8)$$

где суммирование проводится по всем электронным оболочкам с главным квантовым числом k ; n_k — числа заполнения оболочек, а параметр ξ_k для каждой оболочки определяется уравнением (7.5.7). При этом в выражении $b_{\max} = v/\bar{\omega}_k$ фигурирует значение характерной частоты перехода для данной оболочки. Известно, что для атомов водорода справедливо $\bar{\omega} \simeq I$ (I — потенциал ионизации основного состояния). Теперь предположим, что $\bar{\omega}_k$

принимает значение, равное энергии отрыва электрона от данной оболочки. Ее величину можно рассчитать на основе метода, представленного в разделе 6.2. Величина γ в работе Беспалова и др. (БЕСПАЛОВ и др., 1989) выбиралась из сопоставления расчетных и экспериментальных данных, полученных в опытах по торможению протонов в твердых металлах. Наилучшее описание достигается, если γ монотонно меняются в пределах от 2,5 для легких элементов (Be) до 8,1 для тяжелых элементов (U). В этом случае тормозная способность будет слабо зависеть от конкретных значений γ , находящихся в данных пределах. Если пренебречь вкладом от столкновений с тяжелыми частицами, то тормозная способность плазмы может быть вычислена из выражения:

$$F = F_f + F_b. \quad (7.5.9)$$

Рассмотренная нами в данном и предыдущем разделах методика вычисления тормозной способности основана на расчете ионизационного равновесия в рамках обобщенной химической модели плазмы (см. раздел 6.4).

Существует альтернативный подход к расчету тормозной способности горячей плотной плазмы (ПОЛИЩУК и др., 1989). Он состоит в построении радиального распределения плотности электронов в ячейке Вигнера-Зейтца (см. раздел 6.1). С учетом примечания, данного после уравнения (7.5.3), плазменная частота свободных электронов, фигурирующая в выражении для кулоновского логарифма, аналогична энергии связи электронов в ионе. Следовательно, локальная величина плазменной частоты электронов в ячейке Вигнера-Зейтца будет хорошей оценкой для характерной энергии возбужденного электрона. Тогда тормозная способность вещества будет равна:

$$F = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} F_f(n(r), T, v) dr, \quad (7.5.10)$$

здесь производится усреднение по объему v_0 ячейки Вигнера-Зейтца, F_f — тормозная способность электронной плазмы с локальной плотностью $n(r)$ при температуре T для ионов, движущихся со скоростью v .

Итак, мы рассмотрели два метода расчета тормозной способности плазмы. Первый из них основан на расчете ионизационного равновесия в рамках обобщенной химической модели, а второй — на приближении локальной электронной плотности (уравнение (7.5.10)). Полищук и др. (ПОЛИЩУК и др., 1989), а также Беспаловым и др. (БЕСПАЛОВ и др., 1989) было представлено сравнение своих расчетов с экспериментальными данными.

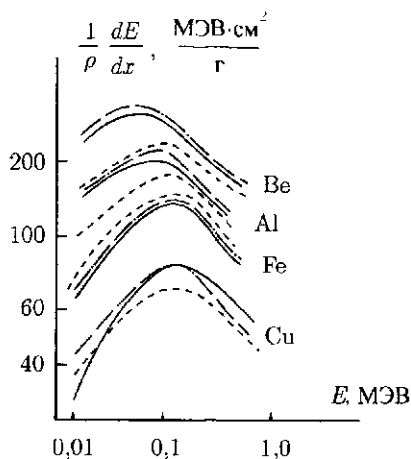


Рис. 7.5.1. Тормозная способность холодной металлической плазмы для протонов. Экспериментальные данные: штрихпунктирная линия – ANDERSON and ZIEGLER (1977); Расчетные данные: сплошная линия – широкодиапазонная модель TCOXM (см. пояснения в тексте), пунктирная линия – БАССКО (1984)

На рис. 7.5.1 представлены результаты расчета тормозной способности на основе обобщенной химической модели (TCOXM) в сравнении с экспериментальными данными (ANDERSON and ZIEGLER, 1977), полученными на в опытах по торможению протонов в холодной металлической плазме. На рис. 7.5.2 представлены результаты расчета по модели TCOXM и опытов по торможению ионов H^+ , H^+_2 , H^+_3 , Ar^+ в низкотемпературной газоразрядной плазме цезия ($T = 2100$ K) с плотностью тяжелых частиц $n_i = 10^{11}$ $см^{-3}$ (TAGGERT et al., 1981). Были проведены также опыты по торможению быстрых тяжелых ионов в плотной газоразрядной плазме водорода с плотностью числа ядер 10^{17} $см^{-3}$ и температурой в несколько эВ (HOFFMANN et al., 1988; WEYRICH et al., 1989; HOFFMANN et al., 1989). Расчет ионизационного равновесия позволяет проанализировать состав плазмы и получить на основе экспериментальных данных численные значения энергии торможения газа свободных электронов и нейтральных атомов. На рис. 7.5.3 представлены результаты наших расчетов в сравнении с экспериментальными данными по торможению ионов $^{238}U^{33+}$, а на рис. 7.5.4 – аналогичные результаты для иона $^{74}Ge^{20+}$. Энергии ионов равны 1,4 МэВ/а м.е. (а.м.е. – атомная массовая единица), потери ΔE измеря-

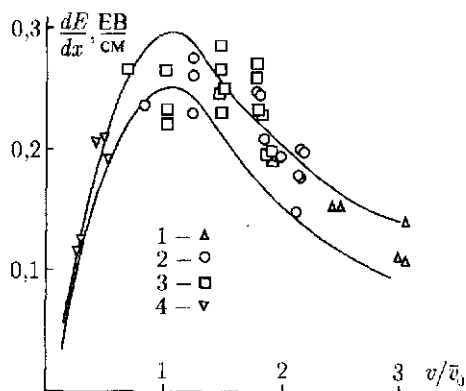


Рис. 7.5.2. Тормозная способность плазмы цезия при $T = 2100$ К и плотности тяжелых частиц $n_i = 10^{11}$ см $^{-3}$ для следующих ионов: 1 – H_1^+ , 2 – H_2^+ , 3 – H_3^+ , 4 – Ag^+ . v – скорость бомбардирующего иона, $mv_e^2/2 = T$. Экспериментальные данные – TAGGERT et al. (1981). Расчетные данные на основе модели TCOXM: пунктирная линия – Ag , сплошная линия – H^+ . Несоответствие кривых обусловлено ион-ионным взаимодействием

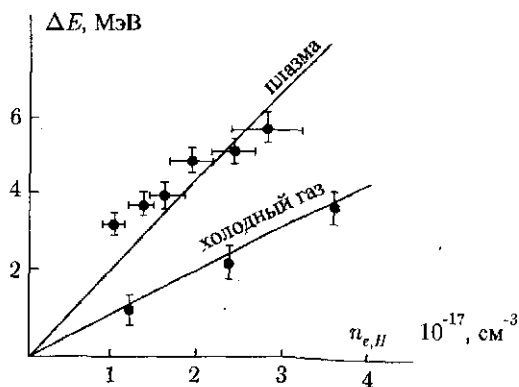


Рис. 7.5.3. Энергетические потери ионов $^{238}\text{U}^{33+}$ в плотном нейтральном и ионизованном водороде. Экспериментальные данные – HOFFMANN et al. (1989). Энергия иона равна 333 МэВ. Расчетные данные – модель TCOXM

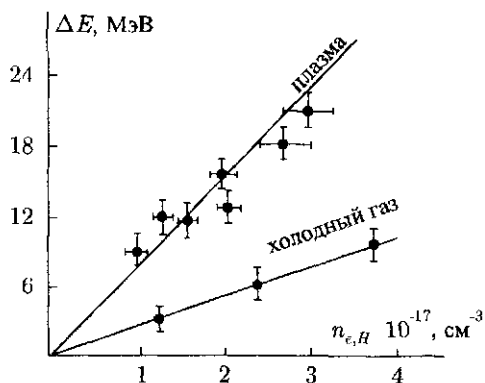


Рис. 7.5.4. Энергетические потери ионов $^{74}\text{Ge}^{20+}$ в плотном нейтральном и ионизованном водороде. Экспериментальные данные — WEYRICH (1989). Энергия ионов равна 103 МэВ. Расчетные данные — модель ТСОХМ

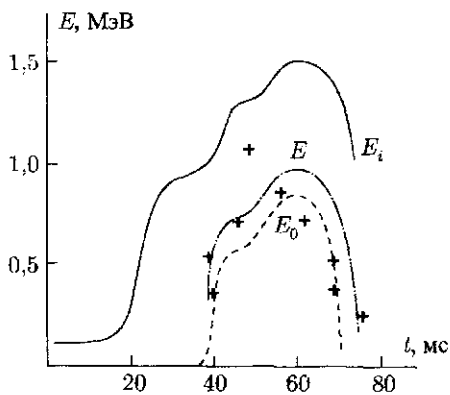


Рис. 7.5.5. Сравнение экспериментальных данных, полученных в опытах по торможению протонного пучка в образце алюминия (BAUER et al., 1988) с результатами расчета по модели ТСОХМ. Крестиками (+) обозначены экспериментальные значения конечной энергии протонов. Расчетные данные: пунктирная линия — результаты численного моделирования (см. пояснения в тексте). Штрихпунктирная линия — оценка для холодной плазмы, сплошная линия — исходная энергия протонов

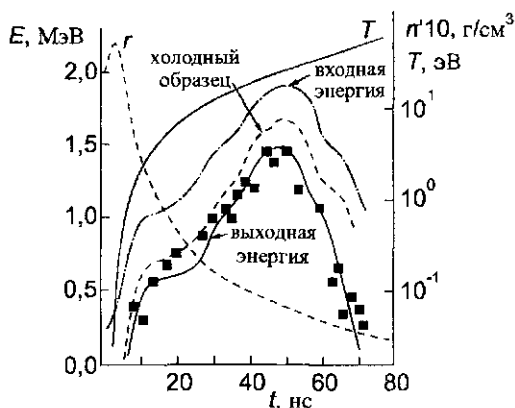


Рис. 7.5.6. Сравнение экспериментальных данных, полученных в опытах по торможению протонного пучка в образце алюминия (BAUER et al., 1988) с результатами расчета по модели ЛПЭ (ПОЛИЩУК и др., 1989). Экспериментальные данные: квадратиками обозначены значения конечной энергии, стрихпунктирная линия — входная энергия протонов, сплошная линия — результаты расчета по модели ЛПЭ. Также на диаграмме показаны значения средней плотности и температуры

лись на расстоянии 40 см и 36 см, соответственно. Заметим, что с ростом степени ионизации тормозная способность увеличивается.

В итоге можно сделать вывод, что рассмотренная нами модель ТСОХМ обеспечивает адекватное описание различных систем: от классической плазмы с разной степенью ионизации до плотной холодной металлической плазмы. Задача экспериментального исследования и генерации горячей плотной плазмы очень сложна. Бауер и др. (BAUER et al., 1988), используя установку KALIF, провели уникальные опыты по торможению быстрых протонов в плотной горячей плазме (созданной за счет выделения энергии, генерируемой мощным пучком протонов в образце алюминия толщиной 12,5 мкм). В описываемом эксперименте параметры плазмы варьировались в широком диапазоне: температура от 300 до 10^5 К, плотность от 10^{-2} до $2,7$ г см $^{-3}$. По ходу эксперимента на входе в образец (E_i) и на выходе из него (E_0) измерялась энергия частиц. Поскольку термодинамические свойства образца меняются с течением времени, можно исследовать зависимость тормозной способности плазмы от плотности и температуры. Чтобы сравнить результаты своих расчетов с результатами подобного рода экспериментов, необходимо выполнить численное моделирование процесса взаимодействия пучка с образцом. Относительная простота и компактность

описанного выше метода расчета тормозной способности позволяют легко запрограммировать его как для одномерного, так и двумерного гидродинамического расчета. Этим методом Беспалов и др. (БЕСПАЛОВ и др., 1989) рассчитали взаимодействие ионных пучков высокой энергии с плоской металлической мишенью. Параметры пучка в рамках расчетов были выбраны соответственно параметрам ускорителя KALIF, который использовался для изучения физических аспектов взаимодействия интенсивных ионных пучков с веществом (МЕСЯЦ, ФОРТОВ, 1990).

Математическое моделирование нестационарного движения мишени, вызванного локальным нагревом среды ионным пучком состояло в решении уравнения движения жидкости с идеальной теплопроводностью. На рис. 7.5.5 представлено несколько результатов расчета. Показана зависимость конечной энергии протонов E_0 от времени. Чтобы оценить влияние температуры и плотности на тормозную способность, на рисунке также показаны данные конечной энергии протонов E_{oc} , рассчитанные при условии, что образец остается холодным и не расширяется. Первое время после начала воздействия на образец протонным пучком временная зависимость параметров E_0 и E_{oc} одинакова, но через некоторое время разница становится существенной. Видно, что значения E_0 в большей степени соответствуют экспериментальным, чем значения E_{oc} .

На рис. 7.5.6 представлены результаты расчета тормозной способности плазмы в приближении локальной электронной плотности (уравнение (7.5.3)) в сравнении с экспериментальными данными, полученными на установке KALIF для образца алюминия толщиной 6,2 мкм (ПОЛИЩУК и др., 1989). Условные обозначения на рис. 7.5.6 совпадают с обозначениями к рис. 7.5.5. Видно, что приближение (7.5.10) адекватно описывает явление увеличения тормозной способности по мере роста температуры.

ГЛАВА 8

Уравнение состояния плотной водородной плазмы и плазмы инертных газов

8.1. Термодинамические свойства и энергетические уровни плотного водорода

Как говорилось во второй главе, для решения астрофизических задач, а также для общего понимания особенностей поведения вещества в экстремальных условиях необходимо знать уравнение состояния плотного водорода и гелия. Для решения различных теоретических и экспериментальных задач не менее важное значение может иметь уравнение состояния и других инертных газов.

При низкой температуре и низком давлении водород представляет собой молекулярно-кристаллическое или твердое тело. При высоких давлениях свыше 100 ГПа можно ожидать, что водород перейдет в высокопроводящее состояние. Подобного рода переход впервые был экспериментально подтвержден для сильно сжатого флюида при давлении 140 ГПа и температуре 3 000 К (WEIR et al., 1996). Аналогичные данные, касающиеся термодинамических свойств и проводимости, были не так давно опубликованы для тяжелого водорода при высоком давлении (ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1994; ТЕРНОВОЙ и др., 1999; NELLIS et al., 1999; ЖЕРНОКЛЕТОВ, МОЧАЛОВ, 2005; ФОРТОВ, 2006; GRYAZNOV et al., 2006a).

Физическая природа такого перехода, проходящего в экстремальных условиях, до сих пор не до конца изучена. Возникает вопрос, сопровождается или нет данный переход фазовым переходом первого рода с соответствующей областью неустойчивости, линией сосуществования и критической точкой? В частности, попытки ответить на эти вопросы предпринимались в рамках химической модели, усовершенствованной с использованием многочастичных методов (см., например, EBELING and RICHERT, 1985; SAUMON and CHABRIER, 1988, 1991, 1992; HARONSKA et al., 1987;

ICHIMARU et al., 1985, 1987, 1988, 1990). В этом случае различные компоненты плотной частично ионизированной плазмы, такие как молекулы H_2 , атомы H , молекулярные ионы H_2^+ или H^- , электроны e и протоны p взаимодействуют между собой посредством эффективных парных потенциалов. Оказалось, что теоретические результаты в данной области, касающиеся уравнения состояния, сильно зависят как от эффективных взаимодействий нейтральных компонент, молекул и атомов, так и от кулоновского взаимодействия заряженных частиц.

Используя концепцию теории твердого тела, наблюдаемый переход можно объяснить закрытием запрещенной энергетической зоны, которое не сопровождается фазовым переходом первого порядка (См. обзор NELLIS et al., 1999). Расчеты зонной структуры, применимые, строго говоря для твердого тела при $T = 0$ К, были проведены для различных структур. Сравнивая между собой энергию гипотетического металла с объемноцентрированной кубической решеткой и энергию плотноупакованной кристаллической решетки атомов или молекул водорода, взаимодействующих между собой посредством эффективных близкодействующих потенциалов, можно убедиться, что металлическая структура оказывается более устойчивой, чем молекулярный кристалл высокой плотности. Кроме того, атомный кристалл всегда обладает большей энергией, чем металлическое твердое тело. Росс (ROSS, 1996) применил эту картину, описывающую твердое тело при $T = 0$ К, для случая ударно сжатой жидкости при конечных температурах, предположив, что частично диссоциированный водородный флюид является смесью молекулярной и металлической фаз. Свободная энергия такой смеси определяется как средняя величина, вычисленная из свободных энергий чисто молекулярной и чисто металлической фаз в рамках модели линейной смеси.

Альтернативный способ описания поведения плотного водорода основан на численном моделировании системы, состоящей из конечного числа электронов и протонов. Это, в первую очередь, расчеты методом Монте-Карло (FILINOV et al., 2001, 2003, 2004; PIERLEONI et al., 1994; MAGRO et al., 1996; MILITZER et al., 2000, 2001). На основе других методов, таких как метод квантовой молекулярной динамики (HOHL et al., 1994; COLLINS et al., 1995, 1998), метод динамики волновых пакетов (KLAKEW et al., 1994; KNAUP et al., 2003; EBELING et al., 2006) и метод Монте-Карло для зависящих от времени интегралов по траектории (PIERLONI et al., 1994; MAGRO et al., 1996), можно изучать равновесное состояние плотного водорода и его транспортные свойства. В рамках некоторых из упомянутых методов были получены предсказания фазового перехода первого рода (KLAKEW et al., 1994; KNAUP et al., 2003; FILINOV et al., 2004).

В настоящей главе приводится усовершенствованное уравнение состояния плотной низкотемпературной водородной плазмы, основанное на методе функции Грина в сочетании с более ранними результатами, полученными для области частично и полностью ионизованной плазмы (EBELING and RICHERT, 1985; BEULE et al., 1999), и усовершенствованными данными для плотной нейтральной жидкости, полученными на основе модели диссоциации (BUNKER et al., 1997). Результаты для степени диссоциации и ионизации, уравнения состояния, области неустойчивости и линии сосуществования, приводятся для температур $T = (2 - 15) \times 10^3$ К и плотностей не выше $1,1 \text{ г/см}^3$.

В рамках метода функции Грина систематическую теорию термодинамических функций может быть построена исходя из следующих выражения для давления и плотности свободной энергии:

$$p(T, \mu) = \int_{-\infty}^{\mu} n(\beta, \mu') d\mu', \quad (8.1.1)$$

$$f(T, n) = \int_0^n \mu(\beta, n') dn'. \quad (8.1.2)$$

Выражение для плотности определяется из условия нормировки для полной плотности элементарных составляющих ($c = e, p$)

$$n_c(\beta, \mu_e, \mu_p) = \sum_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f_c(\omega) A_c(\mathbf{1}, \omega), \quad (8.1.3)$$

где $\mathbf{1} = \{\vec{p}_1, \sigma_1\}$ обозначает импульс и спин. Плотность связана с химическим потенциалом посредством распределения Ферми

$$f_c(\omega) = [\exp(\beta\omega - \beta\mu_c) + 1]^{-1}.$$

Важной величиной в данном формализме является спектральная функция

$$A_c(\mathbf{1}\omega) = \frac{2 \text{Im} \Sigma_c(\mathbf{1}, \omega - i0)}{(\omega - p_1^2/2m_c - \Sigma_c(\mathbf{1}, \omega))^2 + (\text{Im} \Sigma_c(\mathbf{1}, \omega - i0))^2}, \quad (8.1.4)$$

которая связана с собственно энергетической частью $\Sigma_c(\mathbf{1}, z)$, определенной в комплексной z -плоскости. Таким образом в рамках данной методики прослеживается связь между приближениями в уравнении состояния и

приближениями для собственно-энергетической части, которую можно рассчитать для комплексных мацубаровских частот с помощью диаграммной техники. Заметим, что другие термодинамические потенциалы, такие как энтропия и потенциал Гиббса, могут быть получены из известных термодинамических соотношений. Химическая модель может быть перевыведена, если осуществить кластерное разложение собственно-энергетической части и учесть вклады связанных состояний многочастичных T-матриц, фигурирующих в кластерном разложении. С другой стороны, разложение уравнения состояния при малых плотностях может быть получено, если рассмотреть двухчастичные вклады в собственно-энергетическую часть, которые в общем случае содержат двухчастичные связанные состояния и состояния рассеяния. До тех пор пока $\text{Im } \Sigma_c(1, \omega - i0)$ может рассматриваться как малая величина, возможно разложение спектральной функции, которое в дополнение к квазичастичной δ -подобной структуре дает и вклад двухчастичных состояний. В этом случае имеет место так называемая формула Бета Уленбека, которая дает точное выражение для второго вириального коэффициента через энергии двухчастичного связанного состояния и фазовые сдвиги. Оправданной точкой для проведения вычислений может послужить обобщенная формула Бета-Уленбека (EBELING et al., 1976, 1979; KRAEFT et al., 1986, 1988), которая связывает плотности числа составных частиц в физической модели с химическими потенциалами, но включает в себя влияние среды на уровне приближения среднего поля. В частности, для полной электронной плотности с заданной ориентацией спина имеем ($n_e^* = n_e^\uparrow = n_e^\downarrow$):

$$n_e^*(\beta, \mu_e, \mu_p) = \sum_p f_e(E_{qp}(p)) + 2 \sum_{P,n}^{\text{связан.}} g(E_{P,n}) + \quad (8.1.5)$$

$$+ 2 \sum_{P,n} \int \frac{dE}{\pi} g\left(\frac{P^2}{2m_p} + E\right) \frac{d}{dE} [\delta_{P,n}(E) - \sin \delta_{P,n}(E) \cos \delta_{P,n}(E)], \quad (8.1.6)$$

где $f_e(E_{qp}(p))$ — распределение Ферми электронов с квазичастичным дисперсионным соотношением

$$E_{qp}(p) = p^2/(2m_e) + \text{Re } \Sigma_c(p, E_{qp}(p)),$$

а выражение

$$g(E_{P,n}) = [\exp(\beta(E_{P,n} - \mu_e - \mu_p)) - 1]^{-1}$$

означает распределение Бозе для электрон-протонных состояний с общим импульсом P и внутренним квантовым числом n , а спиновые степени сво-

боды учитываются явно. В общем случае необходимо также учитывать электрон-электронный канал, который обуславливает вклад во второй вириальный коэффициент от состояний рассеяния. В отличие от простой формулы Бета-Уленбека, в обобщенной формуле дисперсионное соотношение для одночастичной энергии свободной частицы заменяется многочастичным дисперсионным соотношением. Энергии $E_{P,n}$ двухчастичных связанных состояний и сдвиги фаз рассеяния $\delta_{P,n}(E)$ включают в себя влияние среды, однако, вклад

$$\sin \delta_{P,n}(E) \cos \delta_{P,n}(E)$$

не содержит двойного учета вкладов, которые уже приняты во внимание в квазичастичном сдвиге.

Лишь недавно было установлено (EBELING et al., 2005, 2006), что эффект блокировки вследствие принципа Паули и эффект исключенного объема являются фундаментальными для термодинамических свойств при высоких плотностях.

Микроскопическое происхождение концепции исключенного объема связано с принципом Паули, который является следствием антисимметризации фермионных волновых функций. Одним из следствий этого является появление вклада в эффективное взаимодействие между составными частицами. Его необходимо учитывать в том случае, когда строится химическая модель. Например, на короткодействующее отталкивание между атомами или молекулами принцип Паули оказывает влияние тогда, когда перекрываются электронные орбитали с параллельными спинами. Остановимся на взаимодействии между атомами водорода и свободными электронами, к которому применим принцип исключенного объема, и опишем его с микроскопической точки зрения. Не будем затрагивать вопрос, касающийся эффективного взаимодействия между другими компонентами химической модели, поскольку ответ на него непосредственно вытекает из предыдущего.

Энергии $E_{P,n}$ двухчастичных связанных состояний и сдвиги фаз рассеяния $\delta_{P,n}(E)$ вычисляются из решения эффективного волнового уравнения. В рамках нашего подхода ограничимся рассмотрением двухчастичного случая, когда влияние среды учитывается в приближении среднего поля. Эффективное волновое уравнение для эффектов блокировки Паули имеет вид (согласно KRAEFT et al., 1986, 1988; см. также раздел 3.5):

$$\frac{p^2}{2m_e} \psi_n(p) + [1 - f_e(E(p))] \sum_p V(q) \psi_n(p+q) = E_n^f \psi_n(p). \quad (8.1.7)$$

Здесь множитель, стоящий перед вторым членом, моделирует блокировку Паули, обусловленную свободными электронами. В рассматриваемом на-

ми адиабатическом пределе блокировкой, обусловленной протонами, можно пренебречь.

Сдвиг Паули связан с первым членом правой части уравнения Бете–Солпитера (уравнение (3.5.4) в разделе 3.5). Уровни энергии уравнения Бете–Солпитера включают в себя также сдвиги Фока (второй член правой части уравнения (3.5.4)), сдвиги из-за эффектов экранирования (последняя строчка уравнения (3.5.4)) и сдвиги вследствие эффектов поляризации (не включенные в уравнение (3.5.4)):

$$E_n = E'_n + \Delta E_n^{Fock} + \Delta E_n^{scr} + \Delta E_n^{pol}. \quad (8.1.8)$$

Более общий подход для эффективного волнового уравнения можно построить в рамках кластерного приближения среднего поля, где включены вклады в сдвиги одночастичных энергий и вклад от блокировки Паули для свободных электронов и связанных состояний. Мы далее рассмотрим только основное состояние водорода, тогда сдвиги вследствие экранирования в собственно энергетическую часть и члены от взаимодействия (последняя строчка в уравнении (3.5.4), раздел 3.5) компенсируют друг друга с хорошей точностью. Тогда в нулевом приближении можно пренебречь членами ответственными за экранирование.

Остановимся далее на эффектах блокировки Паули и на тесно связанном с ними вкладом Фока. Сдвиг энергии связи, обусловленный блокировкой Паули, в теории возмущений задается как

$$\Delta E_n^{Pauli} = - \sum_{p,q} \psi_n(p) f_e(E(p)) V_{ep}(q) \psi_n(p+q) = \quad (8.1.9)$$

$$= \sum_p \psi_n(p) f_e(E(p)) \left[-E_n^0 + \frac{p^2}{2m_e} \right] \psi_n(p). \quad (8.1.10)$$

Здесь штрих над знаком суммирования обозначает тот факт, что блокировка Паули относится лишь к параллельным спинам, т.е. в блокировку Паули для атома вносят свой вклад только 50% электронов. В основном состоянии волновая функция имеет вид

$$\psi_0(p) = (2\pi)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{\pi(1+p^2)^2}. \quad (8.1.11)$$

Множитель перед дробью возникает вследствие нормировки согласно периодическим граничным условиям, используемой в квантовой статистике.

В невырожденном пределе при $T > T_F$ можно использовать функцию распределения Больцмана. При достаточно низких температурах $T \ll |E_0|/k_B$, которые, однако, выше температуры Ферми, распределение Больцмана является дельта-подобным со средним значением в точке $p = 0$. Таким образом, получаем

$$\Delta E_0^{\text{Pauli}} = \frac{1}{2} n' \psi_0(0)^2 (-E_0). \quad (8.1.12)$$

Здесь и далее используется безразмерная плотность свободных электронов $n' = n_e^* a_B^3$. Это дает значение сдвига (в ридбергах), которое линейно зависит от плотности

$$\Delta E_0^{\text{Pauli}} = 32\pi n'. \quad (8.1.13)$$

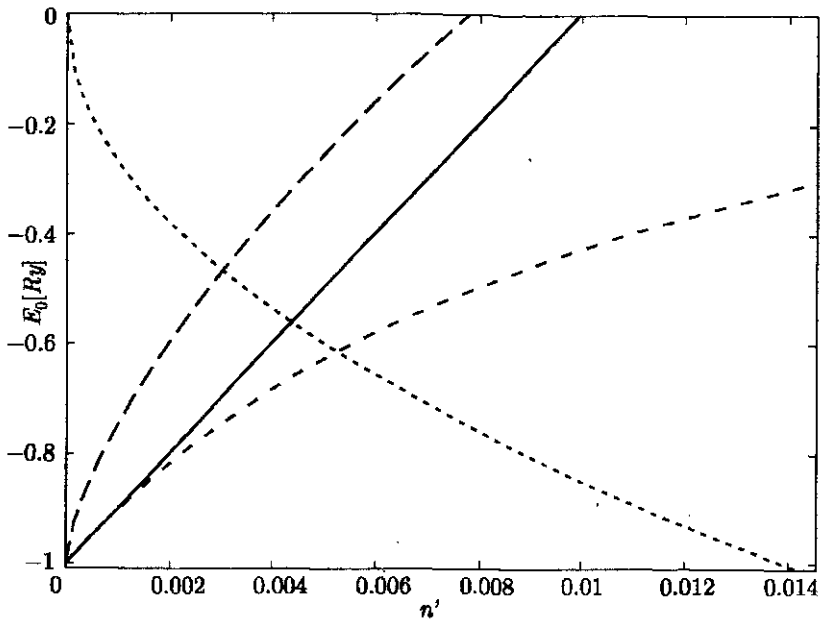


Рис. 8.1.1. Зависимость эффективной энергии основного состояния водорода от плотности. Прямой линией показана низкотемпературная оценка согласно уравнению (8.1.9) в сравнении с оценкой модели ограниченного атома (слева от прямой). Третья кривая (справа от прямой) соответствует вариационному подходу с распределением Больцмана, что обсуждается ниже. Для сравнения также показана зависимость от плотности величины сдвига границы непрерывного спектра, которая пересекает кривые для сдвига

Эффективная энергия, рассчитываемая из уравнения 8.1.8, соответствует прямой линии на рис. 8.1.1. Видно, что основное состояние исчезает при плотности, соответствующей в первом приближении величине $n' = n_e a_B^3 \simeq 0,01$. Это соответствует среднему расстоянию $r_0 \simeq 2a_B$, что ниже критерия Мотта. С учетом снижения границы непрерывного спектра основное состояние будет исчезать уже при $n' = n_e a_B^3 \simeq 0,005$. Условие Мотта

$$r_0 \simeq a_B, \quad \frac{4\pi}{3} n_e^* r_0^3 = 1 \quad (8.1.14)$$

означает, что, если среднее расстояние между электронами меньше или равно радиусу Бора, то атомы разрушаются. Чтобы оценить наше выражение для сдвига, сравним его, например, с моделью ограниченного атома (см. раздел 5.2), в рамках которой предполагается, что атом помещен в твердую сферу радиусом r_0 . Данное предположение основывается на идее, согласно которой электроны образуют некоторое подобие твердой стенки вокруг атома. В первом приближении эта теория дает следующий сдвиг (в ридбергах):

$$\Delta E_0^{\text{ca}} = \pi^2 r_0^{-2}. \quad (8.1.15)$$

Следовательно, энергия будет равна нулю при $r_0 \simeq 3a_B$, т.е. уже при гораздо меньшей плотности (см. также рис. 8.1.1). На основе численных решений уравнения Шредингера можно улучшить оценку, которая даст значение $r_0 \simeq 2a_B$. Наша первая оценка находится в этом же диапазоне. Для сравнения на рис. 8.1.1 показано снижение границы непрерывного спектра согласно оценке, данной в работе Крефта и др. (KRAFFT et al., 1986, 1988). Видно, что запрещенная зона между основным состоянием и сниженной границей непрерывного спектра исчезает уже при $n' \simeq 0,005$.

Если использовать полное распределение Больцмана, то получим температурные поправки к нашей оценке:

$$\Delta E_0^{\text{Pauli}} = a(T)n', \quad (8.1.16)$$

где функция $a(T)$, выражающая зависимость от температуры, равна

$$a(T) = 32\pi G(T/T_0), \quad (8.1.17)$$

$$G(x) = \frac{1}{x^{7/2}} \left[\sqrt{x} \left(1 + \frac{1}{2}x \right) - \sqrt{\pi} \left(1 - x - \frac{1}{4}x^2 \right) \times \right. \\ \left. \times \exp\left(\frac{1}{x}\right) \left(1 - \text{Erf}\left[\frac{1}{\sqrt{x}}\right] \right) \right]. \quad (8.1.18)$$

Здесь $T_0 = 157\,886$ К — температура, соответствующая энергии ионизации. Достаточно хорошим приближением является

$$\alpha(T) \simeq \frac{32\pi}{1 + \frac{TT}{16T_0}}. \quad (8.1.19)$$

В асимптотическом приближении $T/T_0 \ll 1$ (когда температура ниже 20 000 К, а $G(x) \simeq 1$, вышеприведенное выражение для сдвига вновь становится независимым от температуры).

Согласно нашей оценке эффективная энергия становится равной нулю при $n' = n_e a_B^3 \simeq 10^{-2}$. Создается впечатление, что это слишком рано; причина этого в том, что приближение теории возмущений переоценивает эти эффекты. Более приемлемые результаты можно получить из вариационного приближения для решения эффективного уравнения Шредингера. При этом будем использовать метод, основанный на переменном радиусе Бора,

$$\psi_0(p; \alpha) = \frac{8\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}(1 + p^2/\alpha^2)^2}. \quad (8.1.20)$$

Здесь α обозначает параметр, характеризующий заполнение состояний в пространстве импульсов. Это дает нам следующее значение энергии основного состояния:

$$E_0 = \min_{\alpha} E_0(\alpha) = \min_{\alpha} (\alpha^2 - 2\alpha + 32\pi n'/\alpha^2) \text{ Ry}. \quad (8.1.21)$$

Для примера возьмем зависимость энергии для случаев $n' = 0$, $n' = 0,005$ и $n' = 0,0168$, последний из которых соответствует исчезновению энергии основного состояния. Даже в рамках вариационного подхода мы получаем слишком низкие значения плотностей, при которых происходит исчезновение энергетических уровней и, следовательно, полная ионизация. Чтобы это исправить, рассмотрим случай, соответствующий вырождению электронов. В области сильного вырождения $T < T_F$ функция Ферми равна 1 там, где волновая функция отлична от нуля. Данное условие существенно упрощает расчет и позволяет нам снова получить простое выражение, зависящее от плотности. Для фермиевского предела приходим к выражению

$$\Delta E_0^{\text{Pauli}} = 4\pi \int_0^{p_F} dp p^2 [p^2/2 + 1] \psi_0^2(p) = \frac{4\alpha}{\pi} \left[\frac{p'(p'^2 - 1)}{(1 + p'^2)} + \arctan(p') \right] \quad (8.1.22)$$

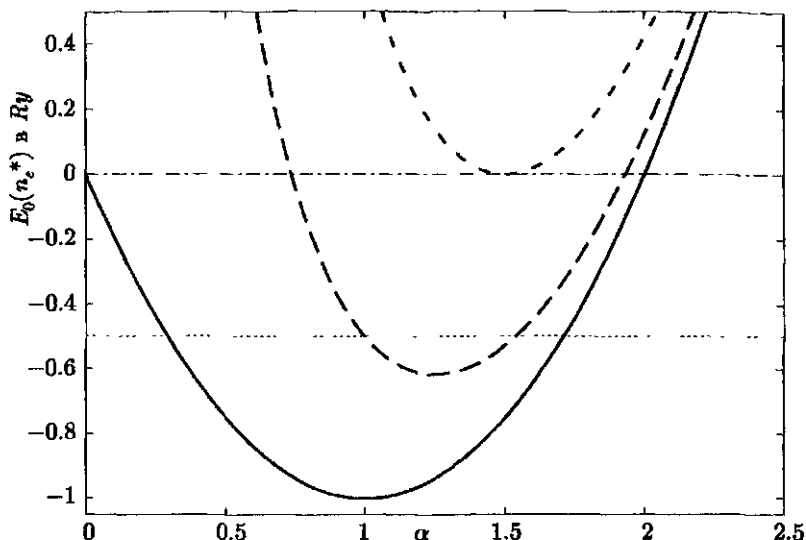


Рис. 8.1.2. Вариационный подход: зависимость эффективной энергии основного состояния от параметра для $n' = 0$, $n' = 0,005$ и $n' = 0,0168$. Минимумы соответствуют значению α в термодинамическом равновесии. Первый случай описывает изолированный атом водорода. Второй случай соответствует промежуточной плотности, когда используемый подход дает гораздо более низкие значения, чем теория возмущений (линия при 0,5). Третий случай $n' = 0,0168$ соответствует плотности, при которой основное состояние сливается с непрерывным спектром

с импульсом Ферми $p_F = 3\pi^2 n_e^*$ и $p' = p_F/\alpha$ (все импульсы в ридбергах). В другом представлении можно получить полную энергию связанного состояния как функцию от вариационного параметра:

$$\Delta E_0^{\text{Pauli}}(\alpha) = \alpha^2 + p_F g\left(\frac{p_F}{\alpha}\right), \quad (8.1.23)$$

$$g(y) = \frac{4}{\pi y} \left[\frac{y(y^2 - 1)}{(1 + y^2)} - \text{arccot } y \right]. \quad (8.1.24)$$

Для больших значений p_F минимум функции находится в точке $\alpha = 0$, откуда получаем $E_0 = 0$. Поправки к этому выражению можно найти только численно. В первом приближении для $p_F < 1$ находим:

$$E_0 = \left(0 - \frac{b}{n'} + \dots\right) Ry. \quad (8.1.25)$$

Начиная с нуля, получим, что следующий член будет порядка $1/n'$. Константу можно оценить численно. Мы используем оценку $b = 0,01$.

Теперь рассмотрим другие сдвиги, помимо сдвига Паули, содержащиеся в уравнении Бете–Солпитера.

До сих пор мы получили лишь первый член правой части уравнения (3.5.4) из раздела 3.5. Следующий член (последний во второй строчке уравнения (3.5.4)) называется *сдвигом Фока*. Этот член можно вычислить, используя аналогичную процедуру. В линейном бальдмановском приближении имеем:

$$\Delta E_n^{\text{Fock}} \simeq -20\pi n'. \quad (8.1.26)$$

Поскольку вклады Паули и Фока имеют схожую структуру, допустим, что и зависимость от температуры будет аналогична рассмотренной. Получим следующее выражение для сдвига, зависящее от температуры (линейное в разложении по плотности):

$$\Delta E_0^{\text{PF}} = 12\pi G \left(\frac{T}{T_0} \right) n' + O(n'^2). \quad (8.1.27)$$

Видно, что в линейном члене остаток, обусловленный разными знаками для сдвигов Паули и Фока, составляет примерно более чем 50 процентов. Однако сдвиг Паули все еще остается наибольшим среди всех сдвигов. Следовательно, можно допустить, что сдвиг Паули определяет не только температурную зависимость, но и зависимость от плотности. Гораздо сложнее вычислить сдвиги в последней строчке уравнения (3.5.4), которые соответствуют вкладам от экранирования и взаимодействия в динамическую собственно-энергетическую часть. Как и прежде, проанализируем лишь основное состояние водорода. Для основного состояния данные сдвиги с хорошей точностью компенсируют друг друга. В первом приближении получаем (см. раздел 3.5):

$$\Delta E_0^{\text{scr}} \simeq -(Z-1)^2 \frac{e^2}{2r_D} - Bn' + \dots, \quad (8.1.28)$$

где r_D — радиус дебаевского экранирования. Для водорода первый член равен нулю, так как $Z = 1$. Следовательно, для водородной плазмы суммой вкладов от эффектов экранирования можно пренебречь. Данная ситуация может измениться для высших порядков, поскольку известно, что энергия основного состояния несколько уменьшается с повышением плотности (см. раздел 3.5). Если проанализировать графическое представление сдвигов вследствие экранирования, которое дается в книге Крефта и др.

(KRAFFT et al., 1986, 1988), то мы получим оценку $B \simeq 20$. Более поздние расчеты, проведенные Арндтом и др. (ARNDT et al., 1996), учитывают динамические эффекты и поэтому дают более низкое значение $B \simeq 10$. Далее будем пренебрегать вкладами от экранирования, поскольку точность существующих расчетов пока неизвестна.

Подобно тому, как мы рассчитали вышеуказанные сдвиги, можно считать сдвиг из-за поляризации атомов свободными зарядами. Будем придерживаться работы (REDMER, 1997). В рамках квазиклассического подхода, пренебрегая вырождением, получаем:

$$\Delta E_0^{pol} = -\frac{27}{2} n_e^* a_B^3 \frac{a_B}{R_{ae}} \frac{1}{1 + f_0^2 \kappa^2 R_{ae}^2} Ry \quad (8.1.29)$$

с численным множителем $f_0 \simeq 2/3$. Далее (и в наших программах) будем пользоваться полученным выражением. Сдвиг вследствие эффектов поляризации, рассчитываемый из уравнения 8.1.29, дает отрицательные вклады в энергетические сдвиги и, следовательно, в плотность свободной энергии. Эти вклады существенны для наших расчетов, поскольку они уменьшают эффект блокировки Паули примерно на 10–20 процентов.

Для удобства численной процедуры при вычислении свободной энергии мы построили простую интерполяцию Паде для уравнений 8.1.16, 8.1.25 и 8.1.27. В формуле Паде учитывается информация, содержащаяся на рис. 8.1.2 и 8.1.3, а также в уравнении 8.1.27. Формула Паде также принимает во внимание эффекты П(аули) и Ф(ока).

$$E_0^{PF} = -\frac{1 + a'(T)n'}{1 + 2a'(T)n' + (a'(T)/b)n'^2} Ry, \quad (8.1.30)$$

где значения коэффициентов $a'(T)$ и b приведены выше.

На рис. 8.1.3 сравнивается зависимость от плотности согласно вышеуказанной формуле, тогда как зависимость от температуры является слабой. В качестве оценки для исчезновения энергетического уровня основного состояния возьмем условие $|E_0| < 0, 1 Ry$. Это определяет плотность, соответствующую критерию Мотта, который гласит, что при этом расстоянии между электронами примерно равняется радиусу Бора. В термодинамических функциях и бозе-распределении основных состояний (атомов) происходят сдвиги, которые мы ранее вычисляли, так что плотность числа атомов уменьшается при фиксированной температуре и фиксированных химических потенциалах. В следующем разделе мы рассмотрим соответствующие эффекты для термодинамики.

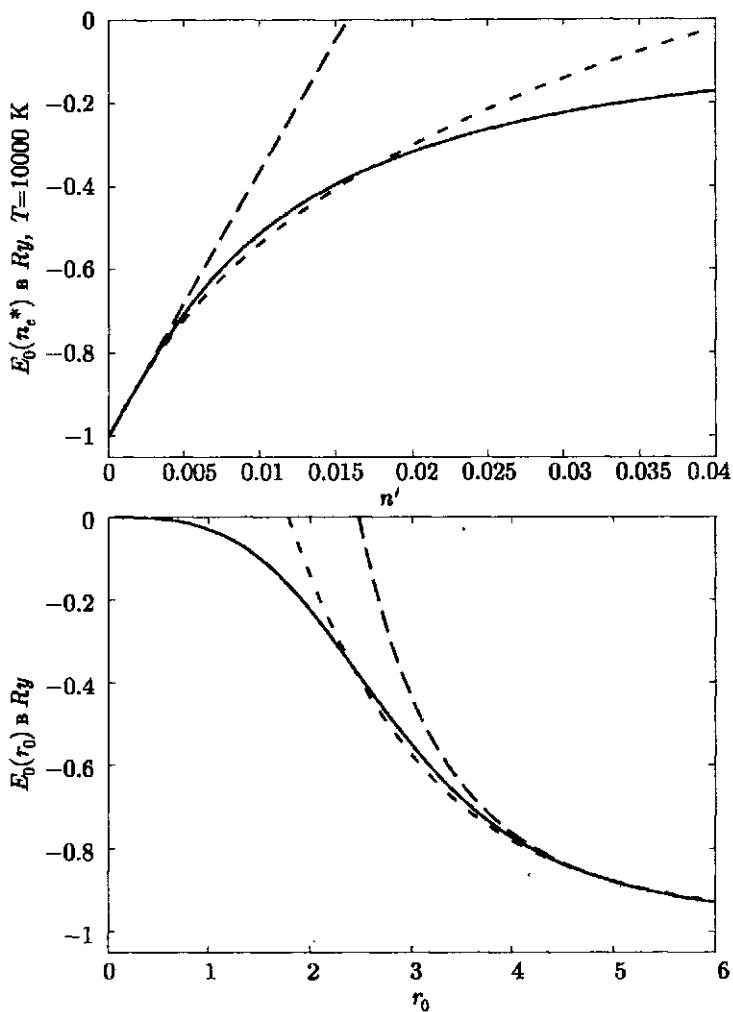


Рис. 8.1.3. Зависимость энергии основного состояния водорода от плотности. Сверху: зависимость от $n' = n_e^* a_B^3$. Показана линейная аппроксимация по n' , включая эффекты поляризации, вариационная теория с учетом распределения Больцмана, включая поляризацию, и приближение Паде [сплошная линия соответствует расчету уравнения 8.1.30]. Снизу: зависимость от параметра Вигнера-Зейтца r_0 . Тоже показано линейное приближение, приближение Больцмана и приближение Паде

Для расчетов мы использовали программный пакет BERO-NX, который разрабатывался с 1999 по 2006 гг студентами и сотрудниками Гумбольдтского университета в Берлине и Ростокского университета. Все версии программы основаны на минимизации свободной энергии водорода или дейтерия в рамках химической модели. По сравнению с методом SAHA, речь о котором шла в главах 4–6, процедура минимизации имеет ряд преимуществ. К ним относится, например, возможность поиска минимумов, локализованных в углах (степени ионизации равны 0 или 1), а также возможность избежать расходимости итераций. Первая версия, BERO-N0, представляет собой программный пакет, разработанный преимущественно Бойле в Гумбольдтском университете в Берлине и описанный в (BEULE et al., 1999, 2001). Следующие версии, BERO-N3, BERO-N5 и BERO-N6, есть программные пакеты, базирующиеся на математическом пакете MATHEMATICA, которые разрабатывались с 2001 по 2004 гг студентами и сотрудниками Гумбольдтского университета в Берлине и Ростокского университета. В работе (EBELING et al., 2003, 2005) представлена общая схема их работы, которая опять-таки основана на минимизации свободной энергии. Самая последняя версия, BERO-N6, включает в себя зависимость энергетических уровней от плотности .

8.2. Уравнение состояния при высокой плотности на основе подхода с зависящими от плотности энергетическими уровнями

Рассчитаем параметры уравнения состояние с помощью зависящих от плотности энергетических уровней, описанных в разделе 8.1.

Данный подход носит название PACH-ES (от англ. «Pade Approximations, Chemical picture, Energy Shifts»), что значит «Аппроксимации Паде, Химическая модель, Энергетические сдвиги»). Расчеты осуществляются с помощью программного пакета BERO-N6.

Сначала обоснуем используемый нами химический подход к расчету свободной энергии плотной водородной плазмы, который был разработан для температурного диапазона от 2000 до 10000 К (BEULE et al., 1999, 2001). В нем учитываются эффекты диссоциации $H_2 \rightleftharpoons 2H$, и ионизации, $H \rightleftharpoons e + p$ давлением, так что на его основе можно объяснить переход из состояния молекулярной жидкости при низких температурах и давлении через частично диссоциированную жидкость при средних температурах в несколько тысяч градусов Кельвина в состояние полностью ионизованной горячей плазмы температурой свыше 10000 К.

Прежде чем обсуждать различные вклады в свободную энергию $F(T, V, N)$, подчеркнем еще раз, что любое разделение на составляющие F является условным. В зависимости от используемой модели, вклады могут меняться, но полная свободная энергия F должна оставаться инвариантной по отношению ко всем возможным вариантам модели. Необходимо удостовериться, что ни один из физических эффектов, включая интересующие нас эффекты Паули, не учитывается в модели дважды. Проведем такую проверку *очень внимательно*.

Будем пользоваться языком, ориентированным на химическую модель. Если рассмотреть с этой точки зрения водород, то можно сказать, что он представляет собой систему, состоящую в основном из двух компонент: плазмы (электронов и протонов) и нейтральной жидкости, составляющие которой образованы атомами и молекулами в основном состоянии. Следовательно, свободная энергия двухкомпонентной системы из нейтральных и заряженных частиц складывается из следующих частей: вкладов нейтральных (F_{nl}) и заряженных (F_{pl}) частиц, а также вкладов связанных состояний и взаимодействия,

$$F(V, T, N) = F_{nl}(V, T, N) + F_{pl}(V, T, N) + F_{bs} + F_{in}. \quad (8.2.1)$$

Вклад связанных состояний запишем в виде:

$$F_{bs} = N_a^* E_0^a + N_m^* E_0^m + N_a^* k_B T \ln \sigma'(T) + N_m^* k_B T \ln \sigma'_m(T), \quad (8.2.2)$$

где приведенная статистическая сумма Бриллюэна–Планка–Ларкина (исключая основное состояние) атома равна:

$$\sigma'(T) = 4 \exp(\beta E_0^a) \Sigma(\exp(-\beta E_n) - 1 + \beta E_n). \quad (8.2.3)$$

Информацию о статсумме молекулы можно найти во многих источниках (BEULE et al., 1999). Если не рассматривать вклады от связанных состояний, имеем «нормальные» составляющие свободной энергии от нейтрального газа F_{nl} и плазмы F_{pl} . Оба эти вклада в свободную энергию распадаются на идеальную составляющую и составляющую взаимодействия, так что в итоге получаем вклад от взаимодействий между нейтральными частицами и зарядами F_{in} . Подчеркнем, что деление на разные составляющие является условным в рамках конкретной химической модели. Несмотря на то, что у нас есть некоторая свобода подобного деления, необходимо строго следить за тем, чтобы не допускался двойной учет вкладов.

Сконцентрируемся, главным образом, на вкладах от сдвигов энергетических уровней.

Сдвиг атомных уровней будем аппроксимировать суммой членов Паули–Фока и поляризации

$$\Delta E_0^a = \Delta E_0^{FF} + \Delta E_0^{pol}. \quad (8.2.4)$$

Поскольку в области перехода из состояния нейтрального газа в состояние плазмы меньше молекул, которым сначала предстоит распаться на атомы, чем самих атомов, мы воспользуемся приближением, в рамках которого молекулы являются комплексом из двух атомов, т. е. сдвиги являются аддитивными

$$\Delta E_0^m = 2\Delta E_0^a. \quad (8.2.5)$$

Поскольку в настоящем разделе внимание концентрируется на влиянии атомных сдвигов, не будем вдаваться в подробности относительно вкладов в свободную энергию нейтральных и заряженных частиц, просто сделаем несколько замечаний. Построение члена, описывающего вклад плазмы, основано на объединении при помощи аппроксиманты Паде (см. раздел 3.3) нескольких результатов, полученных в области полностью ионизованной плазмы. Вклад нейтрального газа рассчитывается по формуле, разработанной на основе усовершенствованных данных для плотного нейтрального флюида в рамках модели диссоциации (BUNKER et al., 1997), которая основана на моделировании классическим методом Монте-Карло частично диссоциированного жидкого водорода при температуре в диапазоне $T = (2 - 10) \times 10^3$ К и плотности в диапазоне $\rho = (0, 2 - 1, 1)$ г/см³. Более подробно это описано в разделе 8.3. Результирующее давление нейтральной составляющей можно представить в виде:

$$p_{nl} = \frac{1}{2}(1 + \beta)nk_B T + p_{nl}^{in}. \quad (8.2.6)$$

Здесь n — общая плотность числа протонов, а β — степень диссоциации молекул. Согласно работе Бойле и др. (BEULE et al., 1999) вклад взаимодействия аппроксимируется полиномом

$$p_{nint}[\text{ГПа}] = \rho^2 [2055 + -2469\rho^2 + 547, 2\rho^3 - 3, 351\sqrt{T} + 3, 882\rho\sqrt{T}] + \rho^2 \ln \rho [688, 2 + 2395\rho - 1, 986\sqrt{T},] \quad (8.2.7)$$

где температура измеряется в градусах Кельвина, плотность — в г/см³, а давление — в ГПа. Свободная энергия находится посредством интегрирования (подробности в разделе 8.3). Степень диссоциации получается из

решения уравнения, описывающего (идеальный) закон действующих масс, который гласит, что

$$\beta = \frac{1}{nK_m} \left[(1 - 4nK_m)^{1/2} - 1 \right], \quad (8.2.8)$$

где K_m — константа атомно-молекулярного равновесия.

Поскольку аппроксимация Бойле является достаточно мягкой, для высоких температур свыше 15 000 К мы использовали выражение Карнахана-Старлинга для твердых сфер, с плавным переходом от аппроксимации Бойле к формуле Карнахана-Старлинга.

Вклад плазмы также складывается из идеальной составляющей и составляющей взаимодействия. К примеру, для свободной энергии имеем:

$$F_{pl} = F_{pl}^{id} + F_{pl}^{in} \quad (8.2.9)$$

Идеальная составляющая равна

$$F_{pl}^{id}(V, T, N) = N_e k_B T z \left(\frac{N_e \Lambda_e^3}{2V} \right). \quad (8.2.10)$$

Здесь V обозначает общий объем системы. Далее, $z(y)$ — функция Ферми, которая аппроксимируется формулой Циммермана (см. раздел 3.1):

$$z(y) = \ln y - 1 + 0,1768y - 0,00165y^2 + 0,000031y^3 \quad \text{если } y < 5,5 \quad (8.2.11)$$

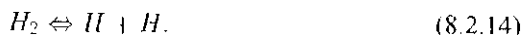
$$z(y) = 0,7254y^{2/3} - 2,0409y^{-2/3} + 0,85y^{-2} \quad \text{если } y > 5,5. \quad (8.2.12)$$

Часть составляющей плазмы, которая обуславливается взаимодействием, задается стандартными аппроксимациями Паде, разработанными в нашей ранней работе (EBELING and RICHERT, 1985; KRAEFT et al., 1986) и подробно изложенными в разделе 3.3. Химическое равновесие между зарядами и нейтральными частицами (атомами и молекулами) вычисляется посредством численной процедуры, основанной на прямой минимизации свободной энергии.

Свои расчеты мы осуществили с помощью программного пакета BERO-6, который является расширением пакетов BERO-3 и BERO-5. Рассмотрим водородную плазму при фиксированной температуре T и плотности протонов n . Примем во внимание процессы ионизации



и процессы диссоциации



Для упрощения расчетов будем пренебрегать образованием других частиц, таких как H_2^- и H^- .

Степени ионизации и диссоциации определяются следующим образом (BEULE et al., 1999; EBELING et al., 2005):

$$\alpha = \frac{n_i}{n_i + n_a + 2n_m}, \quad \beta_d = \frac{n_a}{n_a + 2n_m}, \quad (8.2.15)$$

$$\beta_a = \frac{n_a}{n_i + n_a + 2n_m}, \quad \beta_m = \frac{2n_m}{n_i + n_a + 2n_m}.$$

Они относятся к вариационным параметрам решаемой нами задачи. Свободную энергию необходимо минимизировать относительно них. Заметим, что β_d есть степень диссоциации молекул в атомы, β_a – соответствующее количество протонов, связанных в атомах, а β_m – соответствующее количество протонов, связанных в молекулах. Вследствие баланса для общей плотности протонов

$$n = n_i + n_a + 2n_m \quad (8.2.16)$$

приходим к полезным соотношениям:

$$\beta_a = \alpha(1 - \beta_d), \quad \beta_m = (1 - \alpha)(1 - \beta_d), \quad \beta_d = \frac{\beta_a}{\beta_a + \beta_m}. \quad (8.2.17)$$

Другими словами, лишь один из β -параметров является независимым, и мы вправе делать свой выбор. Сейчас мы делаем выбор в пользу параметров α и β_m и используем простое соотношение:

$$\alpha + \beta_a + \beta_m = 1.$$

Можно показать, что атомы появляются только на достаточно узкой области плоскости температура-плотность. На обширной области плоскости плотность-температура можно в некотором приближении допустить условие $\beta_a = 0$, поэтому α остается единственным свободным параметром. Условие нейтральности предполагает, что плотности электронов и ионов равны друг другу.

$$n_e = n_i. \quad (8.2.18)$$

Теперь введем понятие свободной энергии, приходящейся на один протон и измеряемой в единицах $k_B T$. Данная величина будет зависеть от четырех

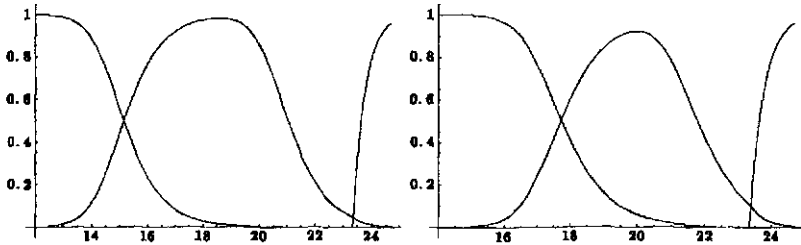


Рис. 8.2.1. Степень ионизации и степень диссоциации при $T = 10\,000$ К (слева) и $T = 15\,000$ К (справа) как функция общей плотности протонов на куб.см (логарифмический масштаб)

независимых параметров. Вариационными параметрами являются степени ионизации/диссоциации. Далее будем обозначать вариационный параметр, характеризующий степень ионизации, как x , а вариационный параметр, характеризующий степень диссоциации, как y . Для решения нашей задачи удобно рассматривать свободную энергию, приходящуюся на полное количество протонов, т. е. величину $\phi = F/(k_B T N_p)$. Итак, имеем

$$\phi(T, n; x, y) = \frac{F}{k_B T N_p}. \quad (8.2.19)$$

Равновесная составляющая находится путем минимизации

$$\frac{\delta\phi}{\delta x} = 0, \quad \frac{\delta\phi}{\delta y} = 0. \quad (8.2.20)$$

Минимумам соответствуют реальные степени ионизации/диссоциации

$$\alpha = x_{\min}, \quad \beta_k = y_{\min}. \quad (8.2.21)$$

Здесь β_k обозначает один из трех параметров диссоциации, введенных выше; напомним, что мы имеем право выбирать. На рис. 8.2.1 показана зависимость степеней ионизации и диссоциации от плотности. Заметим, что функция $\phi(n, T; x, y)$ дает нам не только физическое значение степеней, соответствующее минимумам, но и характеризует отклонение от минимумов (EBELING et al., 2003) на основе соотношения Онзагса

$$P(x - \alpha, y - \beta) \simeq \exp \left[-\frac{\phi(n, T; x, y)}{k_B T} \right]. \quad (8.2.22)$$

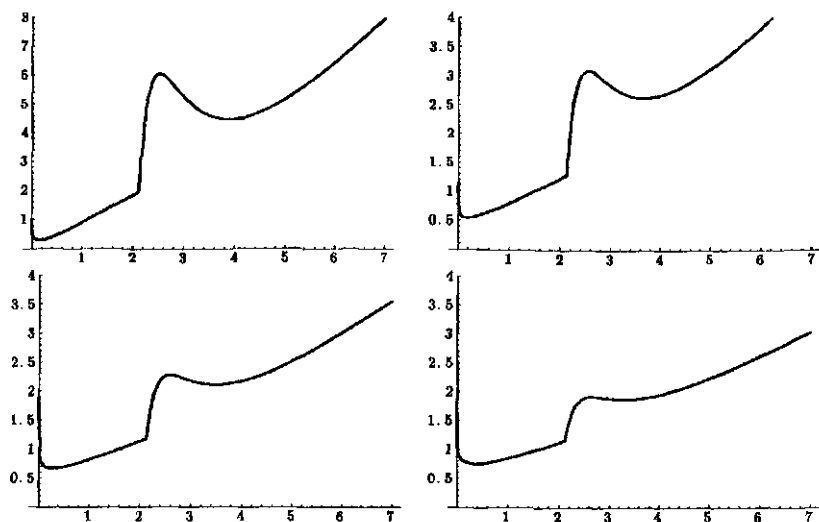


Рис. 8.2.2. Отношение давления к идеальному давлению для всех протонов $nk_B T$ при $T = 5000; 10000; 15000; 20000 \text{ K}$ (начиная с левого верхнего и заканчивая правым нижним рисунком) как функция полной плотности протонов (в 10^{23} на см^3). Расчеты произведены с помощью PACU-ES и BERO-H6

Критическая точка слабого перехода, наблюдаемого при $T > 6000 \text{ K}$, находится в окрестности 25000 K , что на 10000 K выше первоначальных оценок. Подчеркнем, что данный переход не является обычным фазовым переходом первого рода, поскольку для $T > 6000 \text{ K}$ петли p вообще не должно наблюдаться. При $T = 6000 \text{ K}$ петля p исчезает (правый рисунок). Давление перехода равно 109 ГПа .

Все расчеты химического равновесия и уравнения состояния были произведены с помощью численного алгоритма BERO-H6. Еще раз подчеркнем, что наш выбор в пользу минимизации свободной энергии, по сравнению с подходом Саха, обусловлен численными преимуществами первой, которые приобретают особую важность для зависящих от плотности энергетических уровней.

Результаты двух подходов (минимизации и подхода Саха) аналогичны с качественной стороны, но отличны в деталях. Уравнения Саха представляют собой явную формулировку условия минимума: они позволяют найти конкретный минимум, локализованный внутри угла степеней ионизации/диссоциации. Невозможно найти минимумы у границ, скажем $\alpha = 1$ ил $\beta = 0$. Непосредственная минимизация свободной энергии позволяет

найти все существующие минимумы, включая множественные минимумы и минимумы у границ.

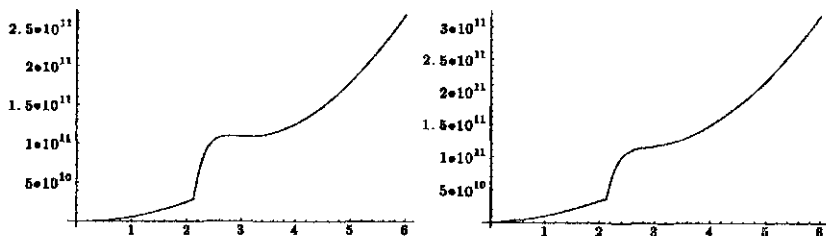


Рис. 8.2.3. Зависимость давления от плотности (в $10^{23}/\text{см}^3$) при $T = 5000 \text{ К}$ и $T = 10000 \text{ К}$. Мы видим, что петля ван дер Ваальса в давлении наблюдается только при $T < 6000 \text{ К}$ и более низких температурах. Расчеты произведены с помощью RASCH-ES и BERO-H6

Мы уже говорили, что итерационное решение уравнений Саха, которые являются сильно нелинейными, может привести к серьезным численным нестабильностям и сходимости к фиктивным решениям. В частности, упомянутые трудности появляются в том случае, если уравнение Саха включает в себя смешанные нелинейности относительно плотностей электронов и атомов в экспоненте. К этому случаю относятся эффекты блокировки Паули. Таким образом, непосредственную минимизацию свободной энергии можно рассматривать как более надежный метод, который дает нам больше информации и включает в себя решения уравнения Саха как частный случай.

По рис. 8.2.2 видно, что давления и плотности, при которых наблюдаются петли ван дер Ваальса, локализируются в той же области, что и в ранней работе (BEULE et al., 1999, 2001).

Давление перехода находится в области 10^{11} Па , т.е. около одного Мбар.

При 5000 К давление перехода будет $p \simeq 110 \text{ ГПа}$ при плотности в диапазоне от 10^{23} до 10^{24} протонов/куб.см. Это значит, что мы находимся в районе $0,5 \text{ г/см}^3$ для водорода и 1 г/см^3 для дейтерия. При 5000 К переход происходит в области, где плотность равна $n = 3,0 \cdot 10^{23}/\text{см}^3$. Чтобы показать, что происходит во время данного перехода, мы изобразили на рис. 8.2.5 поведение кривых α и β_a (процентное соотношение протонов, связанных в атомах). Видим, что переход в состояние полной ионизации оказывается достаточно мягким. В принципе, все термодинамические функции можно рассчитать дифференцированием свободной энергии 8.3.1.

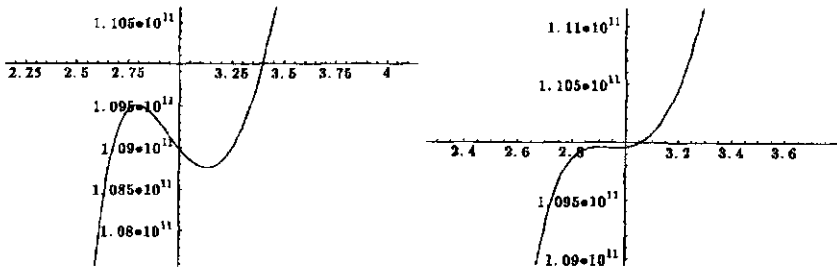


Рис. 8.2.4. Область перехода: зависимость давления от плотности (в $10^{23}/\text{см}^3$) при $T = 5000$ К (слева) и $T = 6000$ К (справа). Петля ван дер Ваальса наблюдается только при $T = 5000$ К (слева) и более низких температурах. Расчеты произведены с помощью PACI-ES и BERO-H6

К примеру, производная энергии по температуре дает энтропию:

$$S(T, V, N) = -\frac{\partial F(V, T, N)}{\partial T}.$$

Объединяя уравнение энтропии с изотермическим уравнением состояния, получаем *изоэнтропическое* (*адиабатическое*) уравнение состояния $p \rightarrow p(s, T)$, где $s = S/Nk_B$ — удельная энтропия, приходящаяся на один

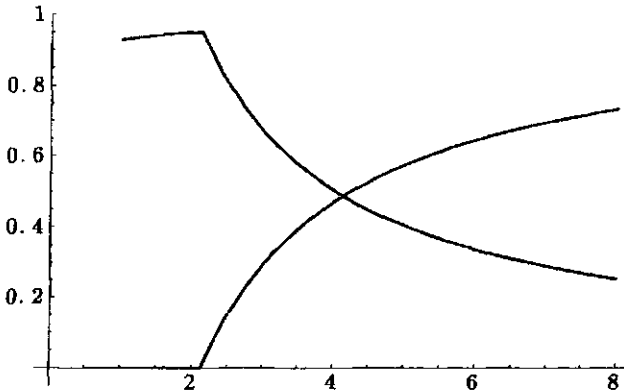


Рис. 8.2.5. Доли свободных протонов и протонов, связанных в атомах, при $T = 10000$ К для области перехода в зависимости от плотности (в $10^{23}/\text{см}^3$). Процентное соотношение протонов, связанных в молекулах, определяется путем влчнтания суммы из единицы (симплексное условие)

протон ($N = N_p$ — общее количество протонов в плазме, включая протоны, связанные в H и H_2). Изозетропическое уравнение состояния и ударные адиабаты были рассчитаны в более ранней работе (BEULE et al., 2001) и будут продемонстрированы в следующем разделе.

В заключение подведем итог: полученный нами результат описывает водород при высоких давлениях в области, где недавние эксперименты подтвердили существование перехода от изолирующего поведения к металлоподобной проводимости (WEIR et al., 1996; ЖЕРНОКЛЕТОВ, МОЧАЛОВ, 2005). Чтобы понять данный переход, необходимо учесть несколько эффектов. Мы показали, что важнейшую роль среди них играет эффект блокировки Паули, согласно которому состояния, занятые электронами атома, не могут быть заняты свободными электронами с такой же спиновой ориентацией. Это ведет к разрушению атомных состояний, требующих большого фазового пространства, при высоких плотностях электронов. Мы рассчитали энергетические сдвиги, обусловленные эффектами Паули, и обсудили эффекты Мотта, решив эффективные уравнения Шредингера для сильно коррелированных систем.

Описание термодинамических свойств мы основывали на усовершенствованном химическом подходе, основывающемся на допущении, согласно которому система представляет собой газовую смесь химических частиц. Теория для составляющих смеси построена на выражениях для свободной энергии, которые не так давно были разработаны для расчета ударных адиабат и изозетроп для плотной водородной плазмы в области частичной диссоциации и частичной ионизации (BEULE et al., 1999). В упоминаемой нами работе доказывалось, что эффект исключенного объема, обусловленный принципом Паули, согласно которому электроны исключаются из внутреннего пространства атомов, имеет огромное значение в области высокого давления. Мы представили результаты явных расчетов для области $5\,000\text{ K} < T < 20\,000\text{ K}$, $0,1 < \rho < 1\text{ г/см}^3$. В частности, мы описали переход из состояния нейтрального водородного газа в состояние высокоионизированной плазмы.

Мы включили в рассмотрение несколько дополнительных эффектов взаимодействия между электронами и нейтральными частицами, которые не учитывались в работе Бойле и др. (BEULE et al., 1999). Так, мы рассчитали сдвиг основного энергетического состояния вследствие:

(1) Эффектов исключенного объема по принципу запрета Паули, когда электроны не могут проникнуть внутрь атомов. Они близки к эффектам по типу Фока.

(2) Эффектов поляризации атомов электронами из окружающей среды.

Мы показали, что эффекты блокировки Паули и эффекты Фока имеют

важное значение при расчете уравнения состояния. Эффекты поляризации дают некоторые поправки. По рис. 8.2.2–8.2.4 видно, что давления и плотности, при которых наблюдаются петли ван дер Ваальса, имеют правильный порядок. Давление перехода находится в области $1, 1 - 1, 3 \cdot 10^{11}$ Па, что превышает Мбар. Плотность перехода равна где-то $3 \cdot 10^{23}$ протон/куб.см. Это значит, что мы находимся в области $0,5$ г/см³ для водорода и 1 г/см³ для дейтерия. Критическая точка перехода первого рода расположена в окрестности $T_c \simeq 6000$ К, а критическая точка мягкого перехода — в районе $T'_c \simeq 25000$ К. Критическая плотность равна $3 \cdot 10^{23}$ см⁻³. Положение критических точек сильно зависит от выбранных аппроксимаций. Несмотря на то, что полученные критические значения данных не сильно отличаются от значений, предсказанных 20 лет назад (EBELING and RICHERT, 1985), в нашем случае не воспроизводится сильный наклон кривой сосуществования, полученный в ранней работе (см. раздел 4.2).

Примечательно то, что на основе нового подхода с использованием зависимых от плотности энергетических сдвигов (PACH-ES) переход оказывается более мягким, чем переход первого рода, уже не наблюдается петель p на изотермах при $T > 6000$ К, хотя все еще есть петля p/nkT при температуре выше 25000 К. Грубый переход первого рода определяется здесь условием, что в некоторой области полной плотности числа протонов изотермический индекс отрицателен

$$\left[\frac{\partial \log p}{\partial \log n} \right]_T < 0. \quad (8.2.23)$$

Данное условие соответствует петлям $p(n, T = \text{const})$. Мягкий переход первого рода задается изотермическим индексом, меньшим единицы

$$\left[\frac{\partial \log p}{\partial \log n} \right]_T < 1. \quad (8.2.24)$$

В этом случае может наблюдаться петля $p/nk_B T$.

До сих пор речь шла о водороде. Чтобы применить уравнение состояния водорода к дейтерию, необходимо провести масштабирование по массе интерполяционной формулы взаимодействия составляющих, т. е. допустить, что одно и то же количество частиц для водорода и дейтерия обуславливает одну и ту же степень диссоциации и идентичные вклады взаимодействия в термодинамическую функцию нейтрального флюида при заданной температуре. В следующем разделе мы опишем альтернативный способ учета эффектов блокировки вследствие принципа Паули (BEULE et al., 1999).

8.3. Уравнение состояния при высокой плотности на основе метода исключенного объема

Начнем со свободной энергии двухкомпонентной системы, состоящей из нейтральных и заряженных частиц. Свободная энергия такой системы складывается из вкладов со стороны нейтральных (F_{nl}) и заряженных (F_{pl}) частиц, каждый из которых расщепляется на идеальную составляющую и составляющую взаимодействия.

Энергетические уровни считаются независимыми от плотности, а взаимодействие между зарядами и нейтральными частицами учитывается с помощью концепции приведенного объема (аналогичного тому, который использовался в разделе 3.1). Данный подход носит название PACH-EV; для расчетов используется программный пакет BERO-НО.

К тому же, у нас есть вклад связанных состояний и вклад, обусловленный взаимодействиями зарядов и нейтральных частиц:

$$F(V, T, N) = F_{nl}(V, T, N) + F_{pl}(V, T, N) + F_{bs} + F_{in}, \quad (8.3.1)$$

$$F_{nl}(V, T, N) = F_{nl}^{id} + F_{nl}^{in}, \quad (8.3.2)$$

$$F_{pl}(V, T, N) = F_{pl}^{id} + F_{pl}^{in}. \quad (8.3.3)$$

Метод исключенного объема основан на идее, согласно которой вследствие принципа запрета Паули внутренняя часть атомов недоступна для электронов. Если V есть общий объем, тогда $V^* = \eta V$; $\eta < 1$ есть приведенный объем, доступный для электронов. По сути, если не учитывать эффекты исключенного объема, данный параметр представляет собой общий объем системы, т.е. $V^* = V$. На этой основе найдем в рамках метода исключенного объема выражение для идеальной свободной энергии электронов:

$$F_{pl}^{id}(V, T, N) = N_e k_B T z \left(\frac{N_e \Lambda_e^3}{2V^*} \right). \quad (8.3.4)$$

Здесь V^* обозначает объем, доступный для электронов. Если не учитывать эффекты исключенного объема, он будет равен общему объему системы, т.е. $V^* = V$. Далее, $z(y)$ — функция Ферми, которую предстоит аппроксимировать. В заряженной подсистеме взаимодействие учитывается посредством аппроксимаций Паде, речь о которых шла в разделе 3.3 (см. также FÖRSTER et al., 1991a, 1991b). Вместо этой формулы, воспользуемся усовершенствованным выражением для вклада электронов f_e , в котором учитываются дополнительные тепловые поправки (STOLZMANN

and BLOECKER, 1996; STOLZMANN and EBELING, 1998). При низких плотностях и/или высоких температурах аппроксимации Паде воспроизводят квантовые поправки к закону Дебая. С увеличением плотности ионы и электроны ведут себя по-разному. Ионы образуют подсистему классических сильно связанных частиц с решетчатой структурой, экранированной частично вырожденной электронной жидкостью. В этом случае аппроксимации Паде сходятся к результатам соответствующего моделирования методом Монте-Карло для ион-ионного и ион-электронного взаимодействий. Проведенный Штольцманом и его сотрудниками (STOLZMANN and BLOECKER, 1996; STOLZMANN and EBELING, 1998) анализ демонстрирует хорошее соответствие с результатами квантового моделирования методом Монте-Карло (PIERLONI et al., 1994; FILINOV et al., 2000, 2001, 2003).

Выражение для нейтральной составляющей основано на результатах расширенного классического метода Монте-Карло, полученных Банкером и др. (BUNKER et al., 1997) для нейтрального частично диссоциированного флюидного водорода. Они рассматривали точки координатной сетки «температура-плотность» в области $T = (2 - 10) \times 10^3$ К и $0,2 \text{ г/см}^3 \leq \rho_0 \leq 1,1 \text{ г/см}^3$, где ρ_0 — общая массовая плотность нейтральных частиц. Для моделирования взаимодействий между молекулами и атомами в плотном флюиде использовались эффективные парные потенциалы exp-6 (BUNKER et al., 1997). Диссоциативное равновесие $H_2 \rightleftharpoons 2H$ рассчитывалось с учетом корреляционных составляющих химических потенциалов на основе вариационной теории жидкости (подробности см. в работе BUNKER et al., 1997). В плотном флюиде диссоциация начинает играть важную роль уже при давлении выше 20 ГПа, что связано со снижением энергии диссоциации с увеличением плотности. Степень диссоциации β определяется как $\beta = n_H/n_0$, где $n_0 = n_H + 2n_{H_2}$ — общая плотность числа ядер водорода в нейтральной составляющей; n_H и n_{H_2} — плотности числа атомов и молекул, соответственно. Банкер и др. (BUNKER et al., 1997) ранее доказали, что результаты для давления нейтрального флюида как функции от плотности находятся в хорошем соответствии с результатами ударно-волновых экспериментов (WEIR et al., 1996), в которых достигалась температура 3000 К. Для плотностей и температур, приводящих к низким степеням диссоциации, давление соответствует данным, полученным другими авторами (SAUMON and CHABRIER, 1989, 1991, 1992; CHABRIER and POTEKHIN, 1998). Они использовали атом-атомный потенциал и, как говорится в работе Банкера и др. (BUNKER et al., 1997), получили систематические отклонения с увеличением доли диссоциированных молекул для высоких температур и/или плотностей.

Результирующее давление нейтральной подсистемы p_0 можно разложить на идеальные составляющие атомов и молекул и составляющие взаимодействия

$$p_{pl} = \frac{2\beta\rho_0 k_B T}{m_H} + \frac{(1-\beta)\rho_0 k_B T}{2m_H} + p_{nl}^{in}(\rho_0, T). \quad (8.3.5)$$

Данные Монте-Карло можно интерполировать с хорошей точностью с помощью разложения составляющей взаимодействия по плотности и температуре согласно формуле:

$$p_{nl}^{in}(\rho_0, T) = \sum_{i \geq 2, j} \left(c_{ij} T^{j/2} \rho_0^i + C_{ij} T^{j/2} \rho_0^i \ln \rho_0 \right). \quad (8.3.6)$$

Преимуществом разложения 8.3.6 является возможность получения всех термодинамических величин в подобной аналитической форме. Для воспроизведения данных Монте-Карло с типичной погрешностью менее 4% по давлению и менее 0,4 эВ/атом по внутренней энергии в пределах области $T = (2 - 10) \times 10^3$ К и $0,2 \text{ г/см}^3 \leq \rho_0 \leq 1,1 \text{ г/см}^3$ достаточно использовать 8-параметрическую подгонку с $i = 2, 3, 4, 5$ и $j = 0, 1$. В таблице 8.1 приведены соответствующие коэффициенты, полученные посредством одновременной подгонки методом наименьших квадратов значений давления и плотности внутренней энергии в 57 точках координатной сетки «плотность-температура» из вышенаписанной области.

Таблица 8.3.1. Коэффициенты интерполяционных формул (8.3.6) и (8.3.7). Давление получается в ГПа, а плотность свободной энергии — в ГДж/м³, если подставлять температуру в 10⁴ К, а плотность — в г/см³

i	c_{i0}	c_{i1}	C_{i0}	C_{i1}
2	2055	-335, 1	688, 2	-198, 6
3	0	388, 2	2395	0
4	-2469	0	0	0
5	547, 2	0	0	0

Для плотности свободной энергии нейтральной подсистемы получаем:

$$f_0 = f_0^{id} + f_0^{in},$$

$$f_0^{in} = \sum_{i \geq 2, j} \left\{ c_{ij} \frac{T^{j/2} \rho_0^i}{i-1} + C_{ij} \frac{T^{j/2} \rho_0^i}{(i-1)^2} [(i-1) \ln \rho_0 - 1] \right\}. \quad (8.3.7)$$

Идеальная составляющая зависит от диссоциационного равновесия

$$f_0^{id} = n_H k_B T \left[\ln \left(\frac{n_H \Lambda_H^3}{\sigma_{\text{ПЫЛ}}} \right) - 1 \right] + n_{H_2} k_B T \left[\ln \left(\frac{n_{H_2} \Lambda_{H_2}^3}{\sigma_{H_2}} \right) - 1 \right]. \quad (8.3.8)$$

Термическая длина волны де Бройля для частиц ν массой m_ν определяется как $\Lambda_\nu = h/\sqrt{2\pi m_\nu k_B T}$. Возбужденные состояния атомов учитываются посредством статсуммы Планка–Бриллюэна–Ларкина (EBELING et al., 1976, 1979)

$$\sigma_{\text{ПЫЛ}}(T) = \sum_{s \geq 1} 4s^2 \left[\exp \left(\frac{I}{k_B T s^2} \right) - 1 - \frac{I}{k_B T s^2} \right], \quad (8.3.9)$$

где $I = 13,598$ эВ есть энергия ионизации атомов водорода в основном состоянии. Статсумма молекулы состоит из электронной, вращательной и колебательной составляющих:

$$\sigma_{H_2} = \frac{16 \frac{k_B T}{hcB}}{1 - \exp \left(-\frac{hc\omega}{k_B T} \right)} \exp \left(\frac{2I + D_0 - hc\omega/2}{k_B T} \right) + \quad (8.3.10)$$

+ вклад со стороны возбужденных электронных состояний,

где $B = 60,853 \text{ см}^{-1}$, $\omega = 4401 \text{ см}^{-1}$, $D_0 = 4,735$ эВ (см. BUNKER et al., 1997).

Основываясь на вышеприведенной формуле, мы рассчитали ионизационное равновесие плазмы путем минимизации полной свободной энергии в при помощи программных пакетов BERO-0 и BERO-5. В области плотностей, где уравнение состояния выявляет неустойчивость, т.е. $(\partial p/\partial V)_T > 0$, мы использовали метод Максвелла, выраженный в терминах давления и суммарного химического потенциала

$$p(\rho_I, T) = p(\rho_{II}, T) \quad \text{и} \quad \mu(\rho_I, T) = \mu(\rho_{II}, T), \quad (8.3.11)$$

где $\mu = \mu_e + \mu_i = \mu_H = \mu_{H_2}/2$ есть суммарный химический потенциал (FOERSTER et al., 1992). На рис. 8.3.1 показаны результаты расчета уравнения состояния $p(\rho, T)$.

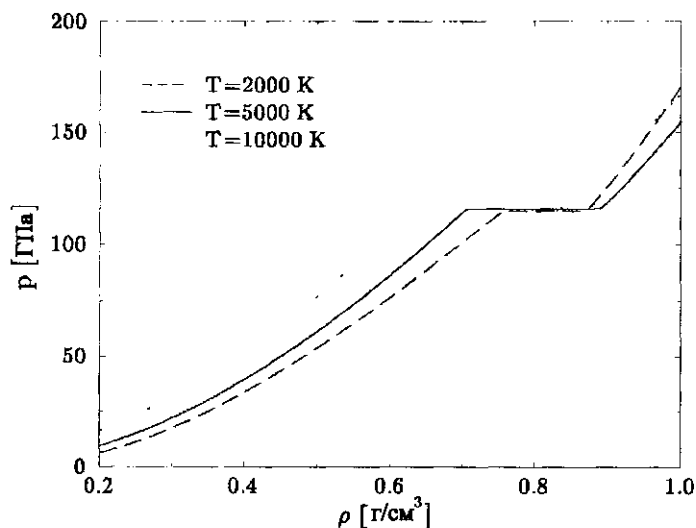


Рис. 8.3.1. Зависимость давления от плотности (в г/см³) для трех значений температуры. В области неустойчивости мы воспользовались построением Максвелла, в результате чего получили постоянное давление в области сосуществования. Расчеты выполнены с помощью программных пакетов BERO-EV и BERO-NO.

Поскольку давление преимущественно определяется корреляционными эффектами, его зависимость от плотности будет более выраженной, чем зависимость от температуры. Фазовый переход, имеющий место в нашей модели, известен под названием *плазменного фазового перехода (PPT)*. В области сосуществования, где температура меньше 10 000 К, плазма состоит из двух фаз I и II, которые отличаются по массовым плотностям примерно на 0,2 г/см³. Плотности сосуществующих фаз ρ_I и ρ_{II} уменьшаются с увеличением температуры. PPT характеризуется скачком массовой плотности, степени ионизации и степени диссоциации. Для рассматриваемого нами температурного диапазона фаза I соответствует почти неионизованному атомно-молекулярному флюиду, тогда как фаза II — частично ионизованной плазме. Давление перехода уменьшается с увеличением температуры и варьируется в пределах от 120 ГПа до 110 ГПа для температурного диапазона $T = (2 - 10) \times 10^3$ К. На рис. 8.4.1 показана соответствующая линия сосуществования $p^{PPT}(T)$ двух фаз, а также линии постоянной степени ионизации и диссоциации.

8.4. Переходы за счет давления, изоэнтропы и ударные адиабаты для плотного водорода и дейтерия

В двух предыдущих разделах мы развили два новых подхода для получения уравнения состояния плотной водородной плазмы. Оба они используют аппроксиманты Паде и химическую модель (РАСН), но по-разному учитывают взаимодействие заряженных и нейтральных частиц. Модель, разработанная в разделе 8.2, получила название РАСН-DE (от англ. «density-dependent energy levels», что значит «зависящие от плотности энергетические уровни»). Модель, представленная в разделе 8.3, получила название РАСН-EV (от англ. «excluded volume», что значит «исключенный объем»). Вкратце отличие между двумя подходами состоит в том, что РАСН-DE включает в себя взаимодействие заряженных и нейтральных частиц с помощью зависящих от плотности энергетических уровней, а РАСН-EV учитывает соответствующие эффекты путем вириального разложения. Оба уравнения состояния обеспечивают реалистичное описание для низких (нейтральный молекулярный флюид) и высоких (полностью ионизированная плазма) температур. Термодинамические неустойчивости появляются в промежуточной области, связанной с фазовым переходом первого рода или мягким фазовым переходом первого рода. *Плазменный фазовый переход*, впервые изученный Норманом и Старостиным (НОРМАН, СТАРОСТИН, 1968, 1970), описывает переход из состояния частично диссоциированного флюида в состояние частично ионизированной плазмы. В настоящем разделе мы рассчитаем соответствующую линию перехода и область сосуществования фаз для температур выше $T = 2000$ К. Линия сосуществования должна заканчиваться в критической точке, как было предсказано другими теориями (EBELING and RICHERT, 1985; HARONSKA et al., 1987; SAUMON and CHABRIER, 1989, 1991). В рамках развитых нами подходов мы получаем $T_c \simeq 15000$ К (метод исключенного объема) и $T_c \simeq 6000$ К (метод зависящих от плотности энергетических уровней). В последнем случае имеет место мягкий переход первого рода в области 6000–25000 К, как показано в разделе 8.2. Для более тщательного изучения области перехода необходимо существующую на сегодняшний день теорию проработать с более высокой точностью. В частности, необходимо с большей точностью проанализировать взаимодействие нейтральных и заряженных частиц.

По сравнению с предыдущими подходами (EBELING and RICHERT, 1985; HARONSKA et al., 1987; ICHIMARU et al., 1988, 1990; SAUMON and CHABRIER, 1991, 1992), рассматриваемые нами подходы позволяют более систематично учитывать корреляции в плотной нейтральной компоненте,

а также взаимодействие заряженных и нейтральных частиц, выходя за рамки таких приближенных методов, как система твердых сфер или теория возмущений.

Остановимся снова на основном результате, полученном в рамках нашей модели: для рассматриваемого нами температурного диапазона с увеличением давления (p выше 1 Мбар) происходит переход в состояние полной ионизации. Данный переход является либо переходом первого рода, либо мягким переходом первого рода. Он связан с почти горизонтальной линией сосуществования при давлениях свыше 1 Мбар. В частично диссоциированном флюиде ниже линии сосуществования степень ионизации никогда не превышает 10^{-4} . Следовательно, проводимость будет достаточно низкой, такой как у полупроводника. С пересечением линии сосуществования значение степени ионизации делает скачок и становится равным примерно одной третьей, что соответствует достаточно высокой плазмоподобной проводимости.

Таким образом, поведение электропроводности, наблюдаемое в рамках многочисленных экспериментов по ударному сжатию (WEIR et al., 1996), качественно воспроизводится рассматриваемым нами уравнением состояния (REDMER et al., 1999). Согласно нашей теории, система в этой области находится в плазмоподобном состоянии, несмотря на то, что проводимость достигает значений, соответствующих металлу. Высокие значения проводимости обуславливаются очень высокими плотностями, высокой температурой и ограниченной степенью ионизации. В области перехода наша модель прогнозирует ситуацию, когда флюид состоит из двух фаз, скажем из капелек высоко проводящей плазмы, расположенных внутри плотной среды нейтрального водорода.

На рисунках 8.10 и 8.11, полученных по модели PACH-EV, показана область перехода, в которой сосуществуют две фазы; область сосуществования является достаточно узкой. Экспериментальная точка, в которой была зарегистрирована (WEIR et al., 1996) металлоподобная проводимость, лежит выше линии сосуществования, что соответствует полученному нами результату со значительной ионизацией в этой области.

При более низких температурах в твердой фазе является ожидаемым переход из состояния молекулярного кристалла в состояние водородного металла. Хотя состояние твердого металлического водорода до сих пор не было обнаружено в рамках экспериментов с алмазной ячейкой (MAO and NEMLEY, 1994), металлизация, вероятно, должна происходить при температуре свыше 300 ГПа. Для более высоких температур $T \geq 10^4$ К в плазме широко изучалось положение плазменного фазового перехода (EBELING and RICHERT, 1985; HARONSKA et al., 1987; ICHIMARU et al., 1985,

1987, 1990). Линия сосуществования заканчивается в критической точке $T_c \approx (10 - 20) \times 10^3$ К. Чтобы сравнить результаты расчета предлагаемого уравнения состояния непосредственно с имеющимися экспериментальными данными, мы вычислили давление p , степень диссоциации β и температуру T вдоль ударной адиабаты для D_2 , считая начальную температуру и плотность типичными для экспериментов по однократному ударному сжатию (DA SILVA et al., 1997; COLLINS et al., 1998) (см. рис. 8.4.3). Температуры до 10 000 К соответствуют максимальной плотности порядка $0,8 \text{ г/см}^3$. В этом диапазоне наша модель находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными (DA SILVA et al., 1997) и моделью линейной смеси (LM) Росса (ROSS, 1996). Сильные отклонения от поведения, предсказываемого таблицами SESAME, обусловлены диссоциацией. Молекулярно-динамическое моделирование в приближении сильной связи (TBMD), проведенное Коллинзом и др. (COLLINS et al., 1998), не воспроизводит сильной сжимаемости в интервале от 30 ГПа до 100 ГПа, которая наблюдается в эксперименте (DA SILVA et al., 1997). Применяя уравнение состояния для водорода, разработанное (SAUMON and CHABRIER, 1989, 1991, 1992) для расчета ударной адиабаты, мы сталкиваемся со скачком сжимаемости при давлении 70 ГПа, который не подтверждается экспериментально. Моделирование методом Монте-Карло на основе интегралов по траекториям (PIMC), проведенное Милицером и др. (MILITZER et al., 1989, 2000), оказывается тем надежнее, чем выше температура, но не позволяет воспроизвести поведение нейтрального флюида при низких температурах. При высоких температурах наша модель дает ударную адиабату высокоионизованной плазмы, рассчитанную на основе аппроксимации Паде в химической модели (PACH-EV) для уравнения состояния заряженной компоненты. В этом диапазоне обе модели PACH хорошо соответствуют разложению по активностям (ACTEX) Роджерса (ROGERS, 1986, 1996). Таким образом, результаты различных подходов, о которых мы говорили, не противоречат экспериментально установленной возвратной части ударной адиабаты при высоких температурах. Как говорилось выше, рассматриваемое нами уравнение состояния дает на низких температурах фазовый переход первого рода с соответствующим разделением двух фаз различной плотности и степени ионизации. Мы полагаем, что данный (резкий и плавный) фазовый переход первого рода тесно связан с экспериментально наблюдаемым электронным переходом к металлоподобной проводимости флюидного водорода (WEIR, 1996; ЖЕРНОКЛЕТОВ, МОЧАЛОВ, 2005; GRYAZNOV et al., 2006a). Наше уравнение состояния дает для этой области давление перехода порядка 100–120 ГПа. Некоторые результаты численного моделирования (MAGRO et al., 1996; KLAKEW et al., 1994; KNAUP et al., 1998)

также выявляют для водорода существование фазового перехода первого рода. Подобное поведение аналогично поведению расширенных флюидов щелочных металлов, в которых происходит электронный переход от металла к диэлектрику вблизи критической точки обычного фазового перехода жидкость-пар (см. HENSEL, 1990). Чтобы окончательно понять природу наблюдаемого перехода из состояния полупроводящего флюида в состояние высоко проводящей фазы при температурах $T \simeq (2 - 10) \times 10^3$ К, необходимо провести более точные эксперименты и разработать более точную теорию.

Недавние ударно-волновые эксперименты указывают на отличительные черты при давлениях в 1 Мбар (≈ 100 ГПа) и конечных температурах. В то время, как металлизация твердого водорода при $T = 0$ К не подтверждается для давлений вплоть до 300 ГПа, в экспериментах по ударному сжатию на двухступенчатой легкогазовой пушке обнаруживается металлоподобная проводимость во флюидной области при давлении около 140 ГПа и температуре 3 000 К (WEIR et al., 1996). Более того, в районе 1 Мбара, где флюидный водород проявляет повышенную сжимаемость, по сравнению с теоретическими прогнозами, обнаруживаются существенные различия между ударными адиабатами, полученными в рамках экспериментов по лазерным ударным волнам (DA SILVA et al., 1997; COLLINS et al., 1998) теоретическим расчетом с использованием уравнения состояния SESAME. Однако, новые результаты моделирования методом молекулярной динамики в рамках обобщенного градиентного приближения теории функционала плотности (LENOSKY et al., 1997) и методом Монте-Карло (MILITZER et al., 1998, 2000; FILINOV et al., 2000, 2001, 2003) на основе интегралов по траектории дают нам более точную информацию относительно свойств при высоких давлениях и, в частности, на ударной адиабате.

Оба эффекта (переход к металлоподобному поведению и повышенная сжимаемость) могли бы коренным образом изменить современное представление о свойствах водорода при сверхвысоких давлениях, таких как в моделях планетарных и звездных недр или таких как при исследовании инерциального термоядерного синтеза. Предполагается, что изоэнтропы и ударные адиабаты являются теоретическими идеализациями реального процесса сжатия. В действительности, процесс нельзя описать ни изоэнтропой, ни ударной адиабатой. Однако, сжатие в однократном скачке уплотнения хорошо аппроксимируется ударной адиабатой, а процесс сжатия в многократных скачках уплотнения более близок к изоэнтропе. Реальный процесс сжатия лежит внутри этих двух теоретических пределов. Известно, что с увеличением температуры давление вдоль изоэнтроп увеличивается гораздо быстрее, чем вдоль ударных адиабат. Таким образом, реальная траекто-

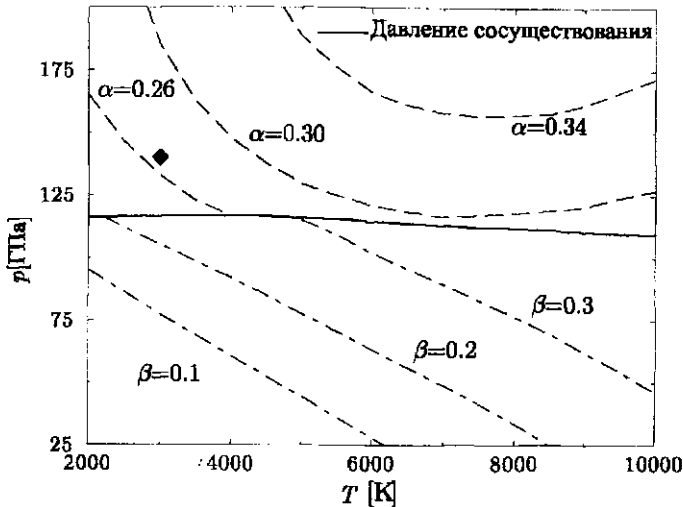


Рис. 8.4.1. Давление на линии сосуществования и линии постоянной степени диссоциации β и ионизации α , соответственно, в зависимости от температуры. Расчеты проведены на основе PACH-EV и BFERO-HO. Условия, при которых наблюдается (WEIR et al., 1996) металлоподобная проводимость, обозначены ромбом

рия сжатия на плоскости $p - T$ может сначала совпадать с ударной адиабатой, а затем измениться до формы изоэнтропы. Значит, расчет набора ударных адиабат и изоэнтроп мог бы дать приблизительную оценку того, как на самом деле происходит процесс сжатия (см. предыдущий раздел). Часть кривой сжатия, совпадающая с изоэнтропой, может пересекать линию сосуществования для плазменного фазового перехода (PPT), которая, как было предсказано, совпадает с траекторией изобары (см. BEULE et al., 1999-2001).

Следовательно, кандидатами для подтверждения существования или несуществования данного фазового перехода являются эксперименты по многократному ударному сжатию. А теперь сделаем несколько замечаний касательно расчета изоэнтроп и ударных адиабат.

В принципе, все термодинамические функции можно вычислить из свободной энергии дифференцированием. Например, изотермическое уравнение состояния получается в результате дифференцирования по объему, а энтропия — результат дифференцирования по температуре:

$$p = -\frac{\partial F(V, T, N)}{\partial V}, \quad S = -\frac{\partial F(V, T, N)}{\partial T}.$$

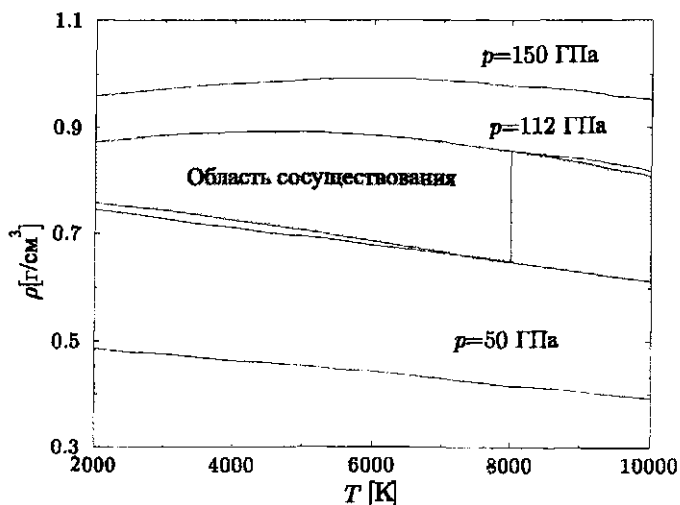


Рис. 8.4.2. Область сосуществования и три изобары в зависимости от температуры (рассчитанные на основе PACH-EV и BERO-H0)

Объединяя эти два выражения, получаем давление вдоль изоэнтропы $p = p(s = \text{const}, T)$:

$$p = p(\rho, T) \quad (8.4.1)$$

$$p = p(s, T), \quad (8.4.2)$$

где ρ — общая плотность, а $s = S/N_p k_B$ — удельная энтропия, приходящаяся на один протон (N_p — общее количество протонов в плазме, включая протоны, связанные в H и H_2). Выражения для изоэнтропы были ранее рассчитаны в работе (BEULE et al., 1997, 2001). Здесь используются выражения для свободной энергии из предыдущего пункта. На рис. 8.4.4 изображены несколько изоэнтроп, рассчитанных для различных значений удельной энтропии s , а также ударная адиабата однократного сжатия и линия сосуществования для водорода в рамках используемого нами подхода. Видим, что, по крайней мере с качественной стороны, кривые совпадают с последними экспериментальными данными (ЖЕРНОКЛЕТОВ, МОЧАЛОВ, 2005; GRYAZNOV et al., 2006a).

Особый интерес представляет тот факт, что кривые на рис. 8.4.4 имеют значительно отличающиеся производные $\partial p / \partial T$. Давление на линии сосуществования несколько снижается с увеличением температуры и, следовательно, практически соответствует изобаре. Давление на ударной адиабате

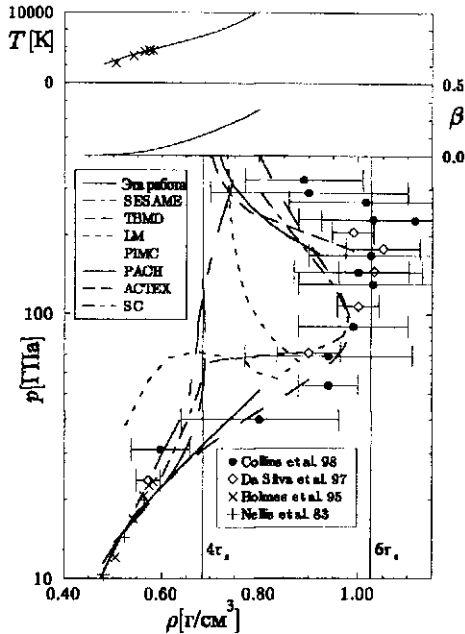


Рис. 8.4.3. Зависимость давления p и температуры T вдоль ударной адиабаты D_2 от плотности: символы \diamond и \bullet обозначают данные, полученные в рамках ударноволновых экспериментов на мощном лазере, а символы \times и $+$ обозначают данные, полученные в рамках экспериментов с легкогазовой пушкой. Текущие результаты (жирная сплошная линия), рассчитанные по модели PACH-EV, сравниваются с ударными адиабатами, построенными с помощью полуэмпирической модели линейной смеси (LM), по таблицам SESAME, с помощью молекулярно-динамического моделирования методом сильной связи (ТВМД) и методом Монте-Карло на основе интегралов по траекториям (PIMC), а также посредством приближений Паде для химической модели (PACH), с помощью метода разложения по активностям (ACTEX) и по уравнению состояния Саумона–Шабрие (SC)

растет с увеличением температуры, однако, достаточно медленно, а вот значение производной с увеличением температуры уменьшается. Изоэнтропы идут круто вверх и близки к изотермам. Заметим, что слабый уклон влево двух низкотемпературных изоэнтроп для $s = 7$ и $s = 8$ не выходит за рамки допустимой погрешности нашей теории. Вполне возможно, что более высокая точность расчета уравнения состояния приведет к почти вертикальному

наклону изоэнтроп. Глядя на рис. 8.4.4, можно сделать следующий главный вывод: едва ли ударные адиабаты пересекут линию сосуществования, а вот изоэнтропы могут пересекать ее вследствие своей большой крутизны.

Для сравнения с экспериментальными данными и другими теориями мы рассчитали соответствующие ударные адиабаты и сравнили их с имеющимися результатами недавних экспериментов по ударному сжатию (COLLINS et al., 1995, 1998; DA SILVA et al., 1997) и другими теориями (ROSS, 1996; LENOSKY et al., 1997; ROGERS, 1997; COLLINS et al., 1998; MILITZER et al., 1998) (см. рис. 8.4.3). Очевидно, что в рассматриваемом диапазоне плотности ($\rho < 0,8 \text{ г/см}^3$) наша модель достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные и обеспечивает получение результатов, близких к результатам модели линейной смеси Росса (ROSS, 1996).

Вдоль ударной адиабаты однократного сжатия значения температуры $T = (2 - 10) \times 10^3 \text{ К}$ соответствуют плотности D_2 , равной примерно $\rho = (0,4 - 0,8) \text{ г/см}^3$. В этой области предлагаемая модель (обозначенная низкими T) находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными и моделью линейной смеси (LM) Росса (ROSS, 1996). Расчетные температуры конечного состояния близки к результатам измерений (HOLMES et al., 1995). Увеличение сжатия связано с возникновением диссоциации, тогда как степень ионизации в этом температурном диапазоне остается ниже 10^{-4} . При высоких давлениях и температурах ударные адиабаты входят в область высоко ионизованной плазмы. Здесь уравнение состояния сводится к предыдущей модели (обозначенной высокими T), которая описывает термодинамические свойства Паде аппроксимацией в рамках химической модели (PACH). В этой области также показаны результаты (ACTEX), полученные Роджерсом (ROGERS, 1997) методом разложения по активностям. Даже для очень сильных ударных волн значение коэффициента сжимаемости $\eta = v_0/v_1 = \rho_1/\rho_0$ между начальным и конечным состояниями (метка 1) не может превышать определенного значения. Максимальное сжатие для идеального одноатомного газа составляет $\eta_{\max} = 4$, тогда как идеальные двухатомные газы можно сжать в 6 раз (если заморозить колебательные моды) или в 8 раз (если данные моды можно возбудить). Поскольку сжатие всегда сопровождается нагревом, все более и более мощные ударные волны приведут в конечном итоге к таким температурам, при которых возникает диссоциация и ионизация и асимптотически достигается значение $\eta = 4$. Из соотношения Пюгонно получаем коэффициент сжатия

$$\eta = 4 \frac{U_{\text{kin},1} + U_{\text{int},1}}{U_{\text{kin},1} + \frac{1}{2}U_{\text{int},1}} + \frac{3U_{\text{bind},1}}{U_{\text{kin},1} + \frac{1}{2}U_{\text{int},1}}, \quad (8.4.3)$$

выбирая $U_0 = 0$ и разделяя внутреннюю энергию $U = U_{\text{kin}} + U_{\text{int}} + U_{\text{bind}}$ на кинетическую составляющую (с меткой kin), составляющую взаимодействия (с меткой int) и энергию связи (с меткой bind) атомов и молекул, включая энергии внутренних возбуждений. Параметр $U_{\text{bind},1}$ обозначает разность энергий связи между конечным и начальным состояниями. Уравнение (8.4.3) показывает, что энергии диссоциации и ионизации обуславливают увеличение относительной плотности, тогда как кулоновское взаимодействие сужает допустимый диапазон сжатия, т. е. два эффекта пытаются компенсировать друг друга. Заметим, что для увеличения температуры конечного состояния T_1 энергия взаимодействия $U_{\text{int},1}$ уменьшается, а значение $U_{\text{bind},1}$ остается постоянным, после того, как достигается полная диссоциация и ионизация. Поскольку $U_{\text{kin},1} \sim T_1$, то при $T_1 \rightarrow \infty$ снова достигается значение для идеального газа $\eta = 4$.

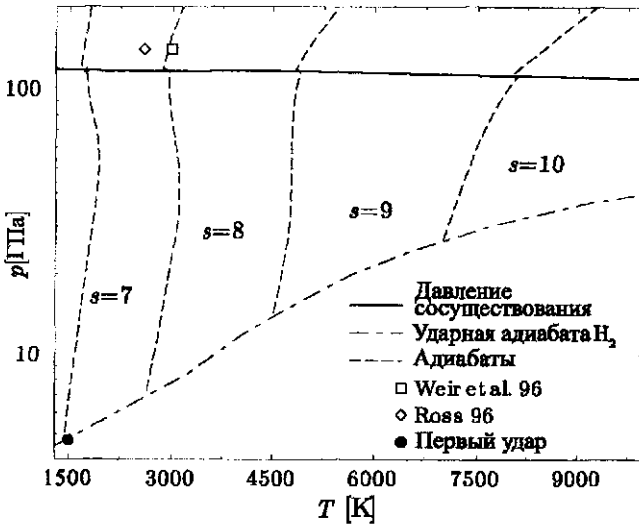


Рис. 8.4.4. Изобары для различных значений удельной энтропии s и ударная адиабата однократного сжатия (начальное состояние см. в тексте), а также линия сосуществования для водорода. Все расчеты проведены по модели RACH-EV. Пустой квадрат: положение перехода диэлектрик-металл, полученное из экспериментов по многократному ударному сжатию (WEIR et al., 1996). Пустой ромб и заштрихованный кружок (\bullet): пересчитанный переход диэлектрик-металл и конечное состояние за прямой ударной волной, соответственно, по модели линейной смеси (ROSS, 1998)

Вышеизложенные соображения накладывают значительные ограничения на ударную адиабату при высоких давлениях. На рис. 8.4.5 показана ударная адиабата, рассчитанная по нашему уравнению состояния, а также максимально высокие экспериментальные давления и ударные адиабаты, рассчитанные по модели АСТЕХ (ROGERS and YOUNG, 1997) и приближению Дебая. Кривые АСТЕХ и PACH разделяются ниже 4 000 ГПа, что соответствует температуре около 600 000 К и параметру неидеальности $\Gamma_{\text{ion}} \approx 0,25$ в области почти полной ионизации. Приближение Дебая и АСТЕХ совпадают до тех пор, пока давление не опустится ниже 1 000 ГПа, а температуры — ниже 200 000 К, т. е. в области, где параметр неидеальности почти равен 1.

Эффекты диссоциации и ионизации преобладают для слабо неидеальной и частично ионизованной и диссоциированной плазмы, значит, $\eta > 4$. Точечная кривая на рис. 8.4.5 (помеченная как идеальная) соответствует ударной адиабате для модели идеальной плазмы, в которой не учитывается ни один из эффектов взаимодействия, но зато учитывается разность энергий связи между начальным и конечным состояниями. В области полной ионизации и для изначально молекулярного дейтерия D_2 уравнение (8.4.3) сводится к параметрическому представлению идеальной ударной адиабаты:

$$\eta = 4 + 184\,370 \text{ K}/T_1.$$

Эксперименты по многократному ударному сжатию позволяют получать высокие давления при более низких температурах, чем в экспериментах с однократным сжатием. Анализ экспериментальных данных показал (ROSS, 1996; NELLIS et al., 1983, 1999), что первая из реверберирующих ударных волн является очень сильной, с $p_1/p_0 \approx 50\,000$, тогда как последующие реверберации являются гораздо более слабыми ($p_{n+1}/p_n \ll 1$) и, следовательно, могут быть аппроксимированы изэнтропой. В этом случае производство энтропии в течение ударного сжатия мало, а рост давления вдоль ударной адиабаты лишь чуть-чуть превышает рост давления вдоль соответствующей изэнтропы. Данная ситуация обуславливается тем, что первая производная $\partial p/\partial V$ и вторая производная $\partial^2 p/\partial V^2$ идентичны для ударной адиабаты и изэнтропы. Обратимся снова к рис. 8.4.4, на котором изображены изэнтропы для разных значений удельной энтропии s , а также ударная адиабата для однократного сжатия и линия сосуществования для водорода, рассчитанные методом PACH. После первой ударной волны давление и температура достигают значений 4,7 ГПа и 1 450 К, соответственно (ROSS, 1996, 1999). Начинаясь здесь изэнтропа ($s \approx 7$) достигает давления в 140 ГПа при температуре ниже 2 000 К и плотности 0,9 г/см³. Эти значения получены экстраполяцией результатов рассмат-

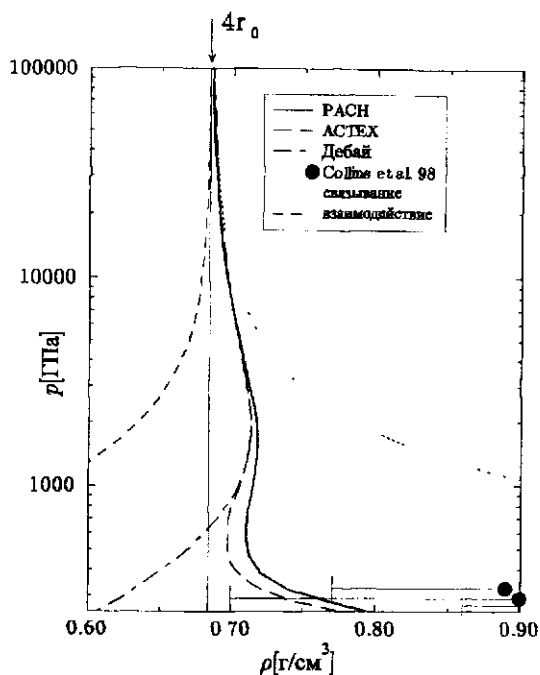


Рис 8.4.5 Ударные адиабаты дейтерия для сверх-высоких давлений, полученные при помощи моделей PACH-EV (сплошная линия), АСТЕХ (пунктирная линия, ROGERS, 1997) и дебаевского приближения (штрихпунктирная линия). Для сравнения показаны максимальные экспериментальные давления (●) (COLLINS et al., 1998). Точечная линия (помеченная как идеальная) соответствует модели идеальной плазмы, в которой не учитывается ни один из эффектов взаимодействия

риваемой нами модели до температуры 2 600 К. Модель линейной смеси (ROSS, 1996) определяет температуру в 2 600 К при плотности $0,7 \text{ г/см}^3$. Более низкая температура соответствует в наших расчетах более высокой степени диссоциации и дополнительной ионизации, полученной в модели PACH для данных условий. Расчеты проводимости на основе изучаемого нами уравнения состояния (REDMER, 1997) не противоречат известным экспериментальным данным (WEIR et al., 1996).

В текущем разделе мы проанализировали положение и форму ударных адиабат, изоэнтроп и линии сосуществования для водорода (дейтерия) в плоскости $p - T$. В частности, мы показали, что значения производной $\partial p / \partial T$ для этих трех теоретических линий существенно отличаются между

собой. Линия сосуществования, расположенная в районе 140 ГПа, слабо зависит от температуры и медленно снижается. Ударная адиабата идет вверх с относительно низкой производной, которая является убывающей функцией температуры. Изоэнтропы резко возрастают, а при малых температурах являются практически вертикальными. Подчеркнем еще раз, что слабый уклон влево двух низкотемпературных изоэнтроп для $s = 7$ и $s = 8$ не превышает допустимой погрешности нашей теории и, возможно, является следствием используемых в расчете приближений.

Из рис. 8.4.4 видно, что ударные адиабаты едва ли могут пересечь линию сосуществования, а вот изоэнтропы могут пересекать ее вследствие своего резкого наклона. Ниже температур в 10 000 К линия сосуществования и давление сосуществования плазменного фазового перехода (PPT) лежат существенно выше ударной адиабаты однократного сжатия водорода (см. рис. 8.4.4). Когда давление вдоль ударной адиабаты достигает области расчетного давления сосуществования, соответствующие температуры находятся в районе расчетной критической температуры PPT. Экстраполяция показывает, что ударная адиабата не пересекает области сосуществования либо, в лучшем случае, приближается к критической точке. Принимая во внимание большую величину погрешности эксперимента по однократному ударному сжатию и существенный разброс различных теоретических прогнозов относительно локализации PPT, можно сделать вывод, что данного рода эксперименты не подходят для точного изучения вопроса о существовании и локализации PPT. Более обнадеживающими с этой точки зрения представляются эксперименты по многократному ударному сжатию.

8.5. Термодинамика ударно-сжатых газов мегабарного диапазона давлений в рамках модели SAHA

Подход на основе квазихимического представления (химической модели), изложенный в главе 5 (условно назовем его SAHA) неоднократно применялся для описания термодинамических свойств плазмы в самых различных областях параметров — от состояний близких к состоянию конденсированного вещества (см. главу 9) до разреженной плазмы Солнца (АЮКОВ и др. 2004, GRYAZNOV et al., 2006b). В настоящем разделе представлены результаты применения подхода SAHA для описания водорода (дейтерия) и инертных газов, сжатых мощными ударными волнами. Эксперименты по ударному сжатию газов (DA SILVA et al., 1997, ANSERSON et al., 2001, KNUDSON et al., 2003, 2004, ГРИГОРЬЕВ и др., 1978, БЕЛОВ и др., 2002, БОРИСКОВ и др., 2003, MOSTOVICH et al., 2000, HOLMES et al., 1995,

ФОРТОВ и др., 2003) охватывают диапазон по давлениям до 100 ГПа выше, по плотностям до $0,8 \text{ г/см}^3$ для дейтерия и 10 г/см^3 для ксенона. Исследованная в экспериментах область параметров характеризуется чрезвычайно сложными и разнообразными процессами, которые должны быть отражены соответствующими физическими моделями. В первую очередь по мере сжатия вещества может резко меняться компонентный состав среды, что сопровождается появлением сильного межчастичного взаимодействия: кулоновского — между электронами и ионами, поляризационного — зарядов с нейтралами, а также короткодействующего — между нейтральными частицами. Поскольку характерное межчастичное расстояние в рассматриваемой нами среде сравнимо с характерным размером атомов и ионов, занимаемая ими часть фазового объема становится недоступной для других частиц, что приводит к росту их кинетической энергии и соответствующим вкладам в свободную энергию таких сильно сжатых неупорядоченных структур. Кроме того, сильное сжатие вызывает изменение энергетического спектра связанных состояний атомов и молекул. По мере сжатия следует учитывать также изменение статистики электронов непрерывного спектра от Больцмановской к статистике Ферми, так как параметр вырождения $n_e \Lambda_e^3$ в этих условиях может возрастать в несколько раз.

8.5.1. Термодинамическая модель. Эффекты электронного вырождения и межчастичного взаимодействия

Для расчетов термодинамических параметров плазмы в мегабарном диапазоне давлений были использованы следующие составляющие полного термодинамического приближения наиболее подробно рассмотренного в главе 5 для описания неидеальной плазмы умеренной плотности:

- Свободная энергия квазинейтральной смеси электронов, ионов, атомов и молекул может быть записана в виде вклада идеально-газовой компоненты и члена, ответственного за межчастичное взаимодействие

$$F \equiv F_i^0 + F_e^0 + F_{i,e,e,e}^{\text{взаим}}. \quad (8.5.1)$$

- Предполагалось, что тяжелые частицы (атомы, ионы и молекулы), подчиняются Больцмановской статистике (при плотностях и температурах, достигаемых в ударно-волновом эксперименте это условие далеко от нарушения), а их вклад имеет стандартный вид:

$$F_i^0 = \sum_j N_j k_B T \left(\ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right), \quad (8.5.2)$$

где σ_j — статсуммы (5.1.13) атомов, молекул и ионов.

- Электроны рассматривались как частично вырожденный идеальный Ферми-газ, при этом идеального газовое слагаемое F_e^0 имело вид (5.3.2) (ЛАНЦАУ, ЛИФШИЦ, 1964).

Заметим, что учет эффектов электронного вырождения весьма важен в обсуждаемой здесь области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения $n_e \Lambda_e^3$ может достигать нескольких десятков. При этом в силу положительности поправки к химическому потенциалу электронное вырождение приводит к более низким значениям степени ионизации плазмы.

- Из всего спектра взаимодействий учитывались кулоновское взаимодействие заряженных частиц и короткодействующее отталкивание частиц на близких расстояниях.

Для описания кулоновского взаимодействия применялся вариант *псевдопотенциальной модели* для многократной ионизации (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980, ГРЯЗНОВ и др., 2004). Центральным моментом этой модели является явный учет «некулоновости» взаимодействия свободных зарядов на близких расстояниях, приводящей в условиях сильной неидеальности к заметному положительному сдвигу не только потенциальной, но и средней кинетической энергии свободных зарядов. При этом, следуя (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980, ГРЯЗНОВ и др., 2004) глубина электрон-ионного псевдопотенциала $\Phi_{ie}^*(0)$ связывалась с границей отделяющей свободные состояния каждой электрон-ионной пары и соответствующие ей связанные состояния в статсумме. Электрон-ионный псевдопотенциал (Глаубермана-Юхновского) имел вид (рис. 8.5.1)

$$\begin{aligned} \Phi_{ie}^*(r) &= -\frac{Z_i e^2}{r} (1 - e^{-r/\sigma_{ie}}); & \{\sigma_{ie} \equiv \sigma_{ie}(n, T)\}, \\ \Phi_{\alpha\alpha}^*(r) &= \frac{Z_\alpha Z_\alpha e^2}{r}; & \{\alpha = i, e\}; \end{aligned} \quad (8.5.3)$$

Параметры корреляционных функций с потенциалом (8.5.3) определялись из условий, справедливых при произвольных значениях кулоновского параметра неидеальности $\Gamma_D = [4\pi(e^2/k_B T) \sum n_\alpha z_\alpha^2]^{-1/2}$.

- 1) Условия локальной электронейтральности

$$\int \left\{ n_{ei} [F_{ei}(r) - 1] + \sum_j n_{ij} Z_j [F_{ij}(r) - 1] \right\} dr = -Z_i. \quad (8.5.4)$$

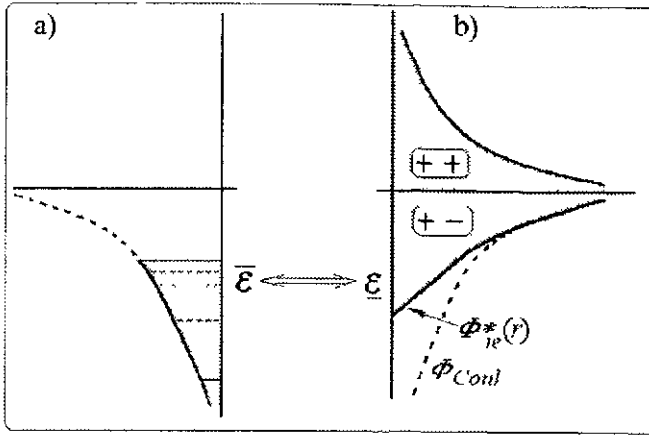


Рис. 8.5.1. Электро-ионный псевдопотенциал Глаубермана-Юхновского: а) связанные состояния, б) непрерывный спектр

- 2) Условия дипольного экранирования

$$\int \left\{ n_{ei} [F_{ei}(r) - 1] + \sum_j n_{ej} Z_j [F_{ej}(r) - 1] \right\} \left(\frac{r}{r_D} \right)^2 dr = -3Z_i. \quad (8.5.5)$$

- 3) Неотрицательности корреляционных функций

$$F_{ik}(r) \geq 0. \quad (8.5.6)$$

- 4) Связи амплитуды экранирующего облака с глубиной электрон-ионного псевдопотенциала

$$F_{ei}(0) \equiv 1 + \Psi_{ei}(0) \approx \beta \Phi_{ei}^*(0); \quad F_{ii} \approx 0. \quad (8.5.7)$$

Заметим, что поправки на взаимодействие зарядов, полученные из условий (8.5.3)–(8.5.7) близки к дебаевским при $(\Gamma_D \ll 1)$ отличаются от них меньшими значениями при $(\Gamma_D \gg 1)$ (ИОСИЛЁВСКИЙ, 1980, ГРЯЗНОВ и др., 2004).

8.5.2. Короткодействующее отталкивание

Вклад короткодействующего отталкивания молекул, атомов, ионов описывался в рамках приближения мягких сфер (YOUNG, 1977), обобщен-

ного на случай многокомпонентной смеси сфер различных радиусов.

$$\Delta f_{SS} \equiv \frac{\Delta F_{SS}}{Nk_B T} = C_s y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{6} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3};$$

$$y = \frac{3Y\sqrt{2}}{\pi}; \quad Y = \frac{4\pi r_c^3}{3} = \frac{\pi\sigma_c^3}{6},$$
(8.5.8)

Где $N = \sum N_j$ — полное число частиц, описываемых приближением мягких сфер, C_s — маделунговская константа (YOUNG, 1977)

$$C_s = 6 + \frac{6.669}{s-3} - 1.043(s-4)^{0.389} \exp[0.156(4-s)]$$

для потенциала

$$V(r) = \varepsilon_{SS} \left(\frac{2r_c}{r} \right)^s.$$
(8.5.9)

При этом средний «радиус» (характерный размер) r_c мягких сфер определялся выражением

$$r_c = \left[\frac{\sum n_j r_j^q}{\sum n_j} \right]^{1/q}.$$
(8.5.10)

Вообще говоря, степень отталкивания s также можно считать средней величиной, если частицы разных сортов обладают различной «мягкостью» отталкивания, то есть

$$s = \left[\frac{\sum n_j s_j^l}{\sum n_j} \right]^{1/l},$$
(8.5.11)

где q, l — степени усреднения в (8.5.10), (8.5.11) (в простейшем случае $q = 3, l = 1$, что и было принято в дальнейшем).

Тогда поправка к давлению за счет отталкивания частиц будет иметь вид

$$\frac{\Delta P_{SS}}{nk_B T} = y \Delta f'_{SS}(y) = C_s \frac{s}{3} y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{2} \frac{s}{9} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3}$$
(8.5.12)

к внутренней энергии

$$\frac{\Delta F_{SS}}{Nk_B T} = \frac{3}{s} \frac{\Delta P_{SS}}{nk_B T} = C_s y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{2} \frac{1}{3} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3},$$
(8.5.13)

к химическому потенциалу

$$\frac{\Delta\mu_i}{k_B T} = \Delta f_{SS} + N \left[\frac{\partial \Delta f_{SS}}{\partial N_i} \right]_{V,T}; \quad (8.5.14)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \Delta f}{\partial N_i} \right)_{V,T} = & \frac{\partial C_s}{\partial N_i} y^{s/3} \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} + \left\{ \frac{s}{3} \frac{1}{y} \frac{\partial y}{\partial N_i} + \frac{1}{3} \frac{\partial s}{\partial N_i} \ln y \right\} \times \\ & \times \left\{ C_s y^{s/3} \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} + \frac{s+4}{2} Q y^{s/9} \frac{1}{3} \left[\frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} \right]^{1/3} \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial s}{\partial N_i} Q y^{s/9} \left[\frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} \right]^{1/3} \end{aligned} \quad (8.5.15)$$

В выражении (8.5.15) производные в правой части определяются выражениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_s}{\partial N_i} \equiv \left[\frac{\partial C_s}{\partial N_i} \right]_{V,T} = & \frac{\partial s}{\partial N_i} \left\{ -\frac{6.669}{(s-3)^2} - 1.043(s-4)^{0.389} \times \right. \\ & \left. \times e^{0.156(4-s)} \left[\frac{0.389}{s-4} - 0.156 \right] \right\}; \end{aligned} \quad (8.5.16)$$

$$\frac{\partial s}{\partial N_i} \equiv \left[\frac{\partial s}{\partial N_i} \right]_{V,T} = \frac{1}{lN} \left[\frac{s_j^l}{s^l} - 1 \right]; \quad (8.5.17)$$

$$\frac{\partial y}{\partial N_i} \equiv \left[\frac{\partial y}{\partial N_i} \right]_{V,T} = \frac{y}{N} \left\{ 1 + \frac{3}{q} \left(\frac{r_j^q}{r_c^q} - 1 \right) \right\}. \quad (8.5.18)$$

Из выражений (8.5.14)–(8.5.18) следует, что поправка к химическому потенциалу частицы тем больше, чем больше ее радиус и степень отталкивания. Отсюда ясно, что для падающей последовательности радиусов ионов с ростом их заряда мы получим и уменьшающийся ряд поправок к хим. потенциалу (8.5.14), что приведет к соответствующему снижению энергии ионизации (диссоциации) для каждого типа частиц. Наиболее просто это видно для частного случая частиц с одинаковыми степенями отталкивания $s_j = s \equiv \text{const}$ и различными радиусами

$$\frac{\Delta\mu_j SS}{k_B T} = \frac{\Delta F_{SS}}{N k_B T} + \frac{\Delta P_{SS}}{n k_B T} \left[\frac{r_j}{r_c} \right]^3. \quad (8.5.19)$$

Отсюда видно, что для частиц с различными радиусами поправки (8.5.19) различны, что в свою очередь может предопределять уменьшение энергий ионизации (диссоциации) с ростом плотности вещества.

Описанная выше термодинамическая модель имеет правильную асимптотику при низких плотностях среды, совпадая с хорошо известными теориями разреженной плазмы и газов. Рассмотрим далее особенности расчета термодинамических свойств с использованием приближения (8.5.1)–(8.5.19) для инертных газов и водорода (дейтерия).

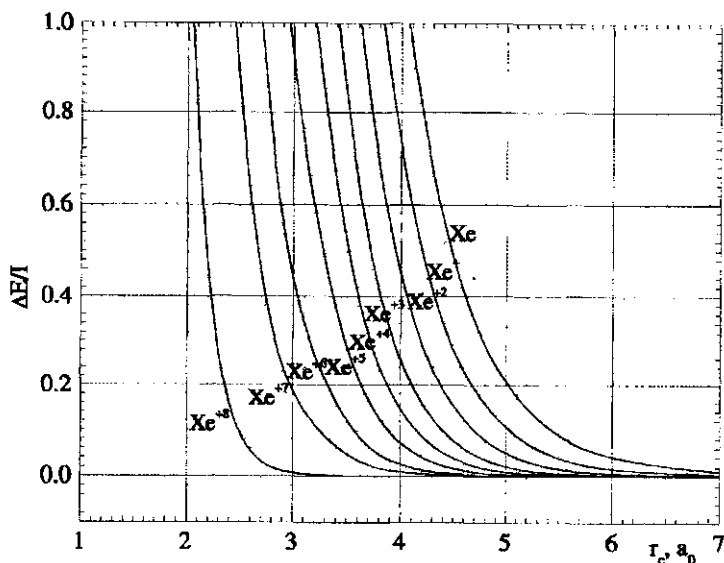


Рис. 8.5.2. Изменение энергии атома и ионов Xe при сжатии в сферической ячейке по отношению к потенциалу ионизации изолированного атома

8.5.3. Термодинамика ударно-сжатых инертных газов. Расчет ударных адиабат и сравнение с экспериментом

При выборе параметров модели (8.5.1)–(8.5.19) для ударно-сжатых исходно сжиженных инертных газов выбор радиусов атомов (при фиксированной энергетической константе SS) и степени отталкивания в приближении смеси мягких сфер (8.5.8)–(8.5.19) осуществлялся из условия наилучшего в рамках этой модели описания расчетных данных холодной кривой ($T = 0\text{ K}$) для плотностей экспериментального диапазона. Полученные в результате такой процедуры значения представлены в следующей таблице.

	s	ε_{SS}	$R_{\text{атом}}$	Q
He	12	0.01354	$2.82a_0$	1
Ar	12	0.0125eV	$3.2a_0$	1
Kr	12	0.0171eV	$3.54a_0$	1
Xe	10.5	0.0221eV	$3.83a_0$	1

Соотношения радиусов атомов и ионов различной кратности определялись из расчета их электронной структуры в приближении ограниченного атома методом Хартри–Фока (см. главу 5). На рис. 8.5.2 представлена зависимость энергии атома и ионов ксенона от радиуса атомной ячейки.

Отношение радиусов атома и ионов выбиралось на линии, где сдвиг энергии при сжатии сравнивался с потенциалом ионизации атома, т.е. на линии $\Delta E/I = 1$.

С использованием изложенной выше модели (8.5.1)–(8.5.19) были проведены расчеты ударных адиабат и изотерм ксенона, криптона и аргона. Во всех трех случаях начальное состояние ударно-сжатых газов соответствовало жидкости. На рис. 8.5.3 представлена ударная адиабата ксенона в координатах плотность-давление.

Наряду с ударными экспериментами представлены также данные по многократному ударному сжатию (МИНИЦЕВ и др., 2000). Видно, что в целом при помощи принятого приближения удается достичь удовлетворительного описания экспериментальных данных. Имеющееся же отличие при низких давлениях и температурах можно объяснить недостаточной точностью аппроксимации состояний ксенона в жидкой фазе.

Использование настоящей модели позволяет также удовлетворительно описать ударные адиабаты жидких аргона и криптона (см. рис. 8.5.4., 8.5.5). Здесь экспериментальные данные взяты из работ (ГРИГОРЬЕВ и др., 1985, ГЛУХОДЕДОВ и др., 1999).

Отметим, что удовлетворительного согласия удается достичь и с измеренными значениями яркостной температуры и скорости звука в этих веществах. Данные по температуре ударно-сжатого ксенона, аргона и криптона представлены на рис. 5.07, 5.08, 5.09 соответственно.

Сравнение результатов расчета с данными эксперимента по ударно-сжатым инертным газам проведенное выше показывает, что модель (8.5.1)–(8.5.19) качественно, а в большинстве случаев и количественно описывает поведение неидеальной плазмы в мегабарном и субмегабарном диапазоне давлений ударного сжатия инертных газов. Подчеркнем основные физические эффекты, присутствующие в модели.

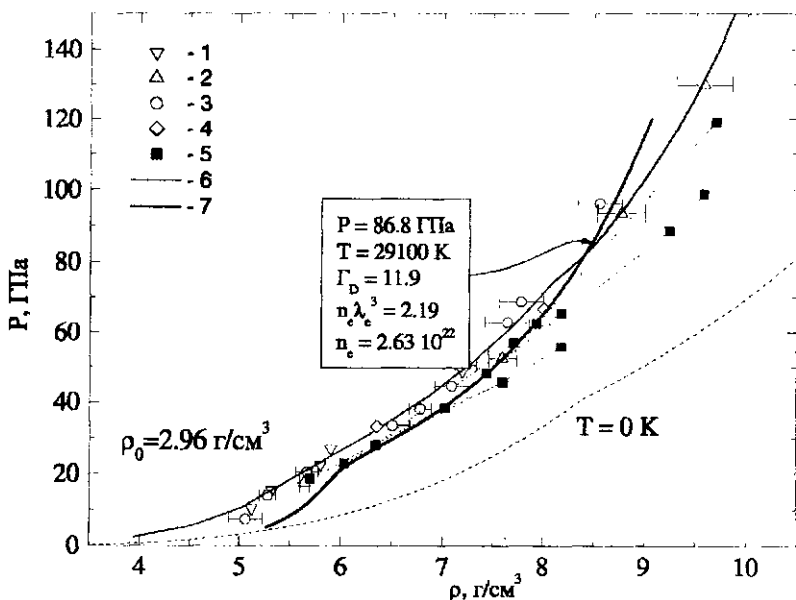


Рис. 8.5.3. Ударная адиабата ксенона. Экспериментальные данные: 1 — (KEELER et al., 1965), 2 — (NELLIS et al., 1982), 3 — (УРЛИН и др., 1992), 4 — (RADOUSKI and ROSS, 1988), 5 — (МИНЦЕВ и др., 2000). Расчетные кривые: 6 — (УРЛИН и др., 1992), 7 — настоящая работа, штриховая линия — «холодная кривая» (УРЛИН и др., 1992)

1. Вырождение свободных электронов учитывалось согласно (5.3.2) (ЛАНДАУ, ЛИФШИЦ, 1964). Степень вырождения достигала значений от нескольких единиц до десятков при максимальных сжатиях. Очевидно положительность поправки к химическому потенциалу в уравнениях химического и ионизационного равновесия приводила к затруднению процесса ионизации и, соответственно к снижению степени ионизации плазмы.
2. В силу высоких значений параметра кулоновской неидеальности, что видно из рисунков 8.5.3–8.5.5 существенным был учет кулоновского взаимодействия заряженных частиц (8.5.3)–(8.5.7), которое описывалось в рамках псевдопотенциальной модели (ИОСИЛГВСКИЙ, 1980, ГРЯЗНОВ и др., 2004), в которой предпринята попытка избежать так называемого «двойного счета» при выделении связанных состояний.

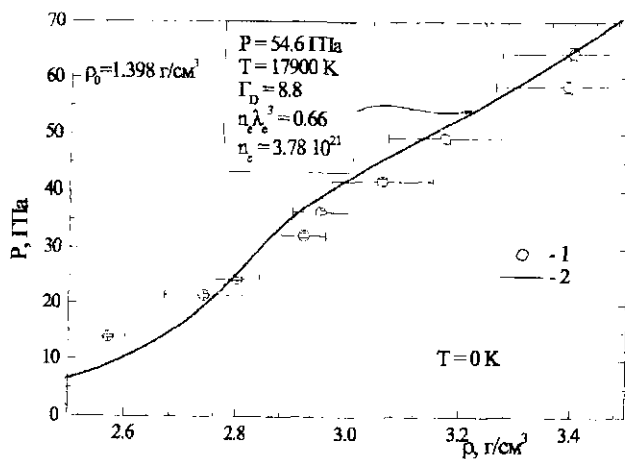


Рис. 8.5.4 Ударная адиабата аргона. Экспериментальные данные: 1 — (ГРИГОРЬЕВ и др., 1985) Расчетная кривая; 2 — настоящая работа; штриховая линия — «холодная кривая»

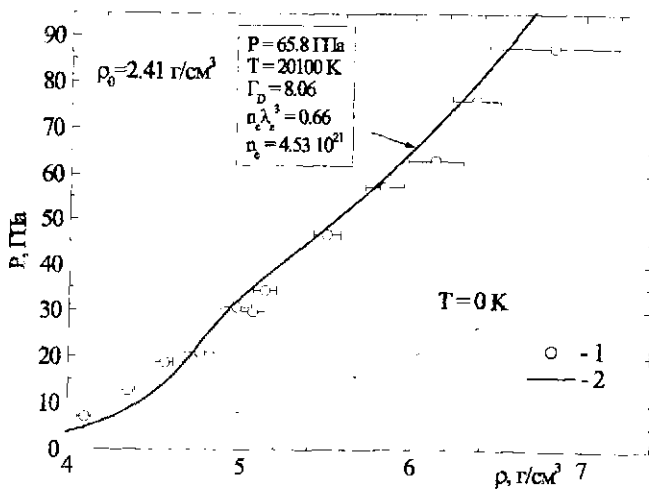


Рис. 8.5.5 Ударная адиабата криптона. Экспериментальные данные: 1 — (ГЛУХО-ДИДОВ и др., 1999). Расчетная кривая; 2 — настоящая работа; штриховая линия — «холодная кривая»

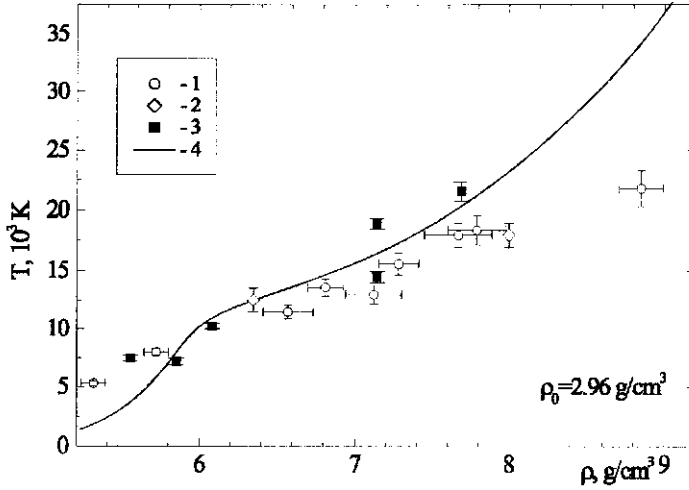


Рис. 8.5.6. Температура вдоль ударной адиабаты ксенона. Экспериментальные данные: 1 — (УРЛИН и др., 1992), 2 — (RADOUSKI and ROSS, 1988), 3 — (МИНЦЕВ и др., 2000), 4 — расчет по модели (8.5.1)–(8.5.19)

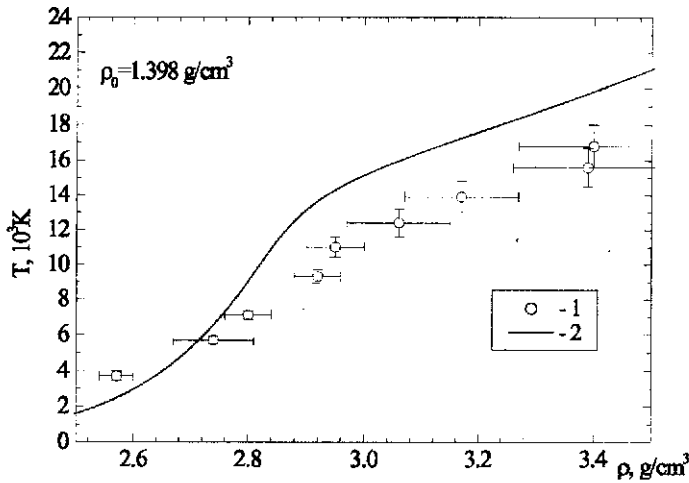


Рис. 8.5.7. Температура вдоль ударной адиабаты аргона. Экспериментальные данные: 1 — (ГРИГОРЬЕВ и др., 1985), 2 — расчет по модели (8.5.1)–(8.5.19)

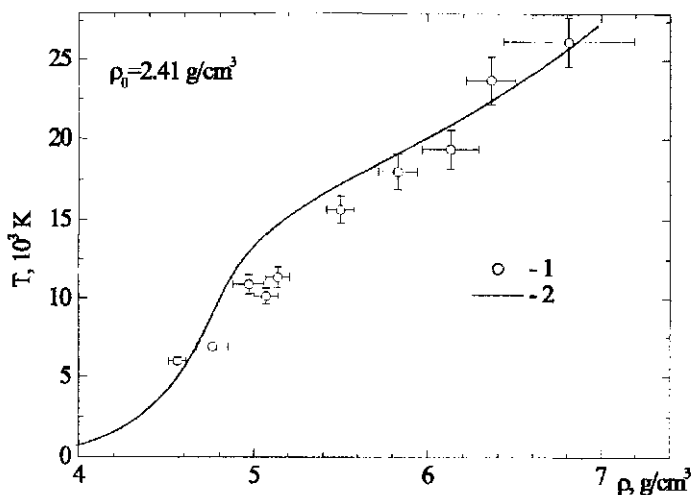


Рис. 8.5.8. Температура вдоль ударной адиабаты криптона. Экспериментальные данные: 1 — (ГЛУХОДЕДОВ и др., 1999). 2 — расчет по модели (8.5.1)–(8.5.19)

когда одни и те же состояния в фазовом пространстве учитываются одновременно как среди свободных частиц, так и связанных состояний (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980, ГРЯЗНОВ и др., 2004). Поправки к идеально-газовой части свободной энергии в этом случае ниже по абсолютной величине, по сравнению с классическим дебаевским приближением, что в области высоких параметров неидеальности не приводит к «дебаевской катастрофе», когда значения давления становятся отрицательными.

3. Короткодействующее отталкивание (8.5.8)–(8.5.19) соответствовало обобщенной модели мягких сфер. Учет этого эффекта весьма важен в этой области фазовой диаграммы из-за высоких плотностей среды, когда межчастичное расстояние сравнимо с размером частиц и ($\Gamma_a = n_a r_a^3 \sim 1$). Заметим, что с уменьшением размера частиц (например, размер ионов с ростом заряда уменьшается), падает значение поправки к химическому потенциалу (8.5.19), что в свою очередь приводит к тому, что распад частиц большего радиуса на частицы меньшего радиуса с выигрышем объема, занимаемого частицами, становится термодинамически более выгодным. В компонентном составе это выражается в резком росте степени ионизации (ионизация давлением). Ниже это бу-

дет показано на примере поведения электропроводности при высоких плотностях вещества.

Заметим, что при сохранении общей тенденции в поведении термодинамических величин, тем не менее, имеются области см. например рис. 8.5.7, 8.5.8, где имеется явное отклонение рассчитанных данных от эксперимента. В частности, это может наблюдаться из-за упрощенного определения параметров отгаливания в модели мягких сфер, что, возможно, потребует в будущем усовершенствования этой процедуры.

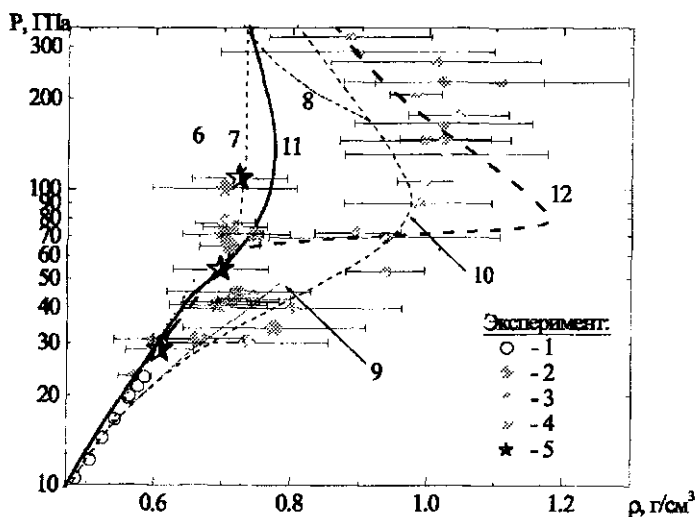


Рис. 8.5.9. Ударная адиабата дейтерия. Эксперимент: 1 – (HOLMES et al., 1999), 2 – (DA SILVA et al., 1997), 3 – (MOSTOVICH et al., 2000), 4 – (ANSERSON et al., 2001, KNUDSON et al., 2003, 2004), 5 – (БЕЛОВ и др., 2002, БОРИСКОВ и др., 2003). Расчет: 6 – (KERLEY, 1972), 7 – (PIERLEONI et al. 1994), 8 – результаты, полученные в разделе 8.4, 9 – PACH (BEULE et al., 1999), 10 – (ROSS, 1998), 11 и 12 – расчет согласно (8.5.1)–(8.5.19) (ФОРТОВ и др., 2003)

8.5.4. Термодинамика ударно-сжатого водорода (дейтерия)

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 H_2-H_2 . В рамках используемой обобщенной модели мягких сфер

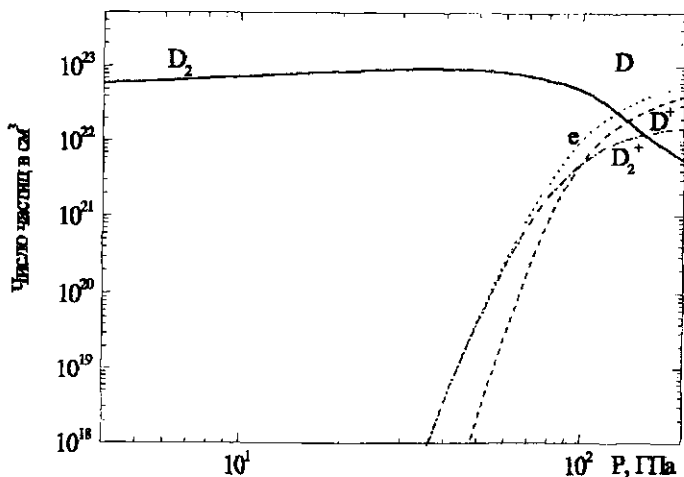


Рис. 8.5.10. Компонентный состав на ударной адиабате жидкого дейтерия при соотношении $d(H)/d(H_2) \approx 0,4$

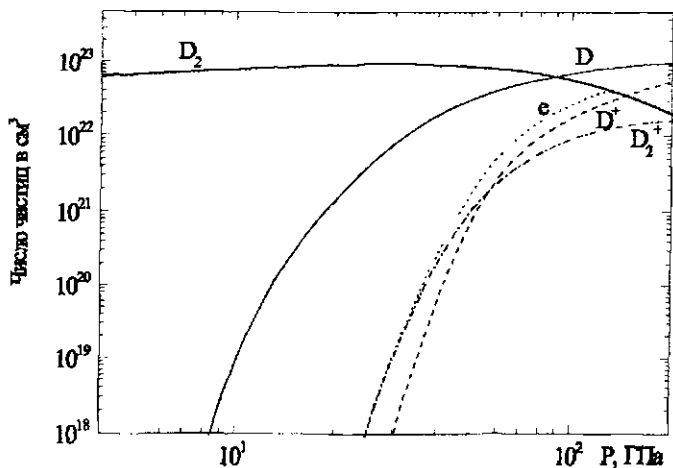


Рис. 8.5.11. Компонентный состав на ударной адиабате жидкого дейтерия при соотношении $d(H)/d(H_2) \approx 0,8$

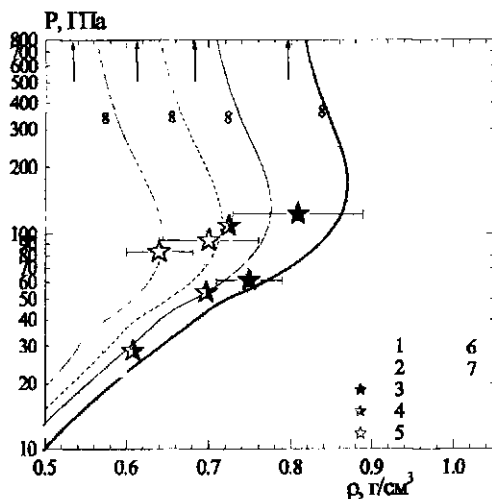


Рис. 8.5.12. Ударные адиабаты газообразного, жидкого и твердого дейтерия. Эксперимент: 1 — (DA SILVA et al., 1997, MOSTOVICH et al., 2000); 2 — (ANSERSON et al., 2001, KNUDSON et al., 2003, 2004); 3, 4 — (БОРИСКОВ и др., 2005), твердый и жидкий дейтерий соответственно; 5 — газообразный дейтерий (ГРИПЕЧКИН и др., 2004). Расчеты 6 — (ROSS, 1998); 7 — (KIRLEY, 1972); 8 — расчет по модели (8.5.01)–(8.5.10)

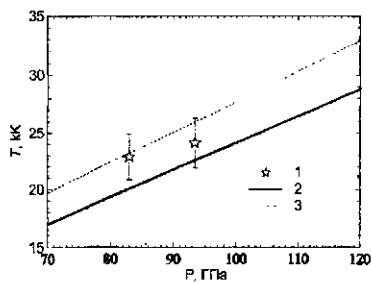


Рис. 8.5.13. Температура ударно-сжатого газообразного дейтерия. Эксперимент 1 — (ГРИПЕЧКИН и др., 2004), левая точка — плотность 0.1335 г/см^3 , правая — плотность 0.153 г/см^3 ; 2, 3 — расчет по модели (8.5.1) (8.5.19) для этих же плотностей соответственно

(8.5.8)–(8.5.19) параметры взаимодействия H_2-H_2 в данной работе выбирались максимально близкими к параметрам строгого «неэмпирического» атом-атомного приближения (YAKUB, 1990, 1999). При этом пренебрегалось нецентральностью взаимодействия H_2-H_2 . Расчеты показали, что при использовании «мягкого» отталкивания $V(r) \sim 1/6^r$ могут быть вполне удовлетворительно описаны как молекулярная часть изотермы $T = 0$ («холодная кривая»), так и результаты точных расчетов термодинамики смеси ($H_2 + H$) методом Монте-Карло (YAKUB, 1990, 1999) для атомно-молекулярной системы.

Как и прежде главной при описании неидеальности, включая случай плотного водорода, является проблема корректного определения всей совокупности *эффективных* потенциалов взаимодействия между всеми участниками смеси. Это относится как к взаимодействиям с участием заряженных, так и нейтральных частиц, 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 тем более справедливо в отношении эффективного взаимодействия с участием (свободных) заряженных частиц, так как в химической модели вклады свободных и связанных состояний должны быть взаимосогласованы (см. приближение (8.5.3)–(8.5.7)). На сегодня существует серьезное противоречие в даваемых различными подходами вида и параметров этих эффективных потенциалов. При этом главным объектом противоречивых данных вне мономолекулярной области являются параметры короткодействующего отталкивания $H - H$ и $H - H_2$. Один из вариантов – результаты псевдоэмпирического атом-атомного приближения (YAKUB, 1990, 1999), приводящие к относительно *большим* «собственным объемам» атома водорода. В терминах используемой модификации модели мягких сфер (8.5.8)–(8.5.19) результаты почти точно соответствуют приближению «аддитивных объемов»: $v(H_2) \approx 2v(H)$. Такой выбор приводит при $\rho < \rho^* \sim 0,3 \text{ г/см}^3$ к результатам, прекрасно совпадающим при $T \leq 10 \text{ кК}$ с точными расчетами методом Монте-Карло (YAKUB, 1990, 1999), а при $T \geq 10 \text{ кК}$ и с неаномальной частью результатов квантового Монте-Карло (PIMC (PIERLEONI et al. 1994)). При этих же температурах результаты также удовлетворительно согласуются и с остальными вариантами первопринципных подходов: квантовой молекулярной динамики (TBMD (COLLINS et al., 1995)) и метода «волновых пакетов» (WPMMD (KNAUP et al., 1999)).

На рис. 8.5.9 приведены все имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные по однократному ударному сжатию жидкого дейтерия.

В проведенных в прямой ударной волне экспериментах с легкогазовыми пушками (HOLMES et al., 1999) реализованы давления до 25 ГПа (кружочки 1 на рис. 8.5.9). В исследованиях по генерации ударных волн с помощью мощных лазеров (DA SILVA et al., 1997, MOSTOVICH et al., 2000) (2, 3) достигнуты давления до 300 ГПа и обнаружена аномально высокая сжимаемость дейтерия при давлениях $P > 40$ ГПа. Проведенные в последнее время эксперименты на Z -пинче (ANSERSON et al., 2001, KNUDSON et al., 2003, 2004) (4) и на сферических взрывных системах (БЕЛОВ и др., 2002, БОРИСКОВ и др., 2003) (5) не подтверждают наличие этой аномалии вплоть до $P \sim 70$ ГПа.

Расчетные ударные адиабаты, полученные при использовании уравнения состояния SESAME (KERLEY, 1972) (кривая 6), не предсказывают такой аномалии поведения ударной сжимаемости, также как и использование полуэмпирических уравнений состояния (ГРИГОРЬЕВ и др., 1978). Не ожидается она и при использовании «первопринципных» подходов: метода квантового Монте-Карло (PIERLEONI et al. 1994) (кривая 7) и молекулярной динамики (COLLINS et al., 1995). В работе (ROSS, 1998) (кривая 10) представлено интерполяционное уравнение состояния дейтерия, качественно описывающее экспериментальные результаты, полученные на лазерах.

Рассмотренный в настоящей работе подход также не воспроизводит этот «провал» в сторону неожиданно высоких степеней сжатия ($\sigma_{\max} \equiv \rho_{\max}/\rho_0 \sim 6,5$ против ожидаемого $\sigma_{\max} \sim 4$) в положении ударной адиабаты дейтерия в области $P \sim 0,5 \div 2$ Мбар (кривая 11), а также и не содержит аномалий типа фазовых переходов при $\rho \geq 1$ г/см³.

Совершенно иначе выглядит термодинамика сжатого водорода (дейтерия) если для описания взаимодействий $H - H$ ($D - D$) воспользоваться широко принятым в приближенных расчетах потенциалом $H - H$ из (REE et al., 1983), а для взаимодействия $H - H_2$ воспользоваться стандартными правилами комбинирования. В терминах модификации модели мягких сфер, принятой в данной работе это соответствует заметно меньшему отношению «собственных» объемов H и $H_2 d(H)/d(H_2) \approx 0,4 \mapsto 2v(H)/v(H_2) \approx 0,13$. Такой выбор «собственного» размера атома немедленно приводит при $\rho \geq 0,3$ моль/см³ к «диссоциации давлением», сопровождаемой провалом в ударной адиабате дейтерия (кривая 12).

Различие в поведении дейтерия с разными соотношениями радиусов атома и молекулы дейтерия в первую очередь проявляется на компонентном составе. На рис. 8.5.10 и 8.5.11, представлен компонентный состав на удар-

ной адиабате жидкого дейтерия. Видно, что различие в сжимаемости дейтерия в двух вариантах расчета ($d(H)/d(H_2) \approx 0,4$ и $d(H)/d(H_2) \approx 0,8$) связано с более быстрой диссоциацией в первом случае.

В самое последнее время во ВНИИЭФ были получены новые экспериментальные данные по ударно-сжатому дейтерию. В отличие от процитированных выше и приведенных на рис. 8.5.9 экспериментов, опыты (ГРИШЕЧКИН и др., 2004), проводились с газообразным дейтерием предварительно сжатом до давлений 1500 и 2000 бар, что соответствовало плотностям 0,1335 и 0,153 г/см³. В этой работе одновременно с параметрами ударной адиабаты измерялась и температура. Модель, примененная нами ранее при описании экспериментов, приведенных на рис. 8.5.9 была использована и для описания экспериментов (ГРИШЕЧКИН и др., 2004). На рис. 8.5.12 приведены результаты расчета по модели (8.5.01)–(8.5.19) для четырех ударных адиабат с начальными плотностями 0,1335, 0,153, 0,171 (жидкий дейтерий) и 0,199 (твердый дейтерий) г/см³.

Заметим, что последние расчеты по модели (8.5.01)–(8.5.19), представленные на рис. 8.5.12, 8.5.13 проведены с соотношением $d(H)/d(H_2) \approx 0,8$, что соответствует результатам работы (YAKUB, 1990, 1999). Таким образом, рис. 8.5.12, 8.5.13 (на рис. 8.5.13 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных в координатах давление–температура) показывают, что модель представленная в настоящей главе позволяет описать непротиворечивым образом всю совокупность экспериментов для различных начальных плотностей дейтерия, выполненных во ВНИИЭФ.

ГЛАВА 9

Термодинамика ударно-сжатых пористых металлов

К настоящему времени основной объем экспериментальной информации по свойствам сильносжатой плазмы получен динамическими методами (FORTOV, 1982), использующими технику мощных ударных волн для сжатия и необратимого разогрева вещества. Применение взрывных и пневматических метательных устройств в такого рода опытах позволило провести изучение и анализ теоретических моделей термодинамических, электрофизических и оптических свойств ударно-сжатых цезия, инертных газов и водорода в условиях сильной неидеальности. Кратность ионизации ($\alpha = n_e / (n_a + n_i)$) такой среды не превышала 1–2. Выход за рамки этих условий — переход к параметрам, при которых вещество становится многократно ионизованным с частично вырожденными электронами — может быть осуществлен путем привлечения экспериментальных данных по сжатию сплошных и пористых металлов ударными волнами с амплитудным давлением в сотни тысяч–миллионы атмосфер. К настоящему времени получен значительный объем экспериментальных данных по динамическому сжатию металлов (см. компендиумы (VAN THIEL, 1977, MARSH, 1980, ЖЕРНОКЛЕТОВ и др., 1996) и содержащиеся там ссылки) с использованием ударных волн, генерируемых взрывом химических (VAN THIEL, 1977, АЛЬТШУЛЕР 1965, АЛЬТШУЛЕР и др. 1980), и ядерных (АЛЬТШУЛЕР и др. 1996) ВВ, пневматическими метательными устройствами (JONES et al., 1966), а в последнее время — концентрированными лазерными (АНИСИМОВ и др., 1983), рентгеновскими (FORTOV et al., 1996) и ионными (BAUMUNG et al., 1996) потоками. Данные по ударно-волновому сжатию, дополненные результатами регистрации адиабат разгрузки ударно-сжатых металлов, составляют основу для конструирования полумпирических уравнений состояния (БУШМАН и др., 1992) путем оптимального выбора констант в функциональных термодинамических соотношениях, основанных на упрощенных термодинамических моделях. Вместе с тем, в процессе ударного сжатия уже при относительно невысоких (100–200 ГПа) давлениях происходит плавление, а затем — прогрес-

сирующая термическая ионизация и ионизация вещества давлением. Таким образом, реализуется плотная неупорядоченная многократно ионизованная система заряженных частиц — электронно-ионная среда со сложным спектром интенсивных коллективных взаимодействий. По этой причине ударно-сжатые металлы представляются интересным объектом для проверки теоретических моделей сильносжатой плазмы как с точки зрения поиска плазменных фазовых переходов (НОРМАН, СТАРОСТИН, 1970), так и для анализа различных моделей описания неидеальности сильносжатой плазмы при высоких концентрациях энергии. По существу, речь идет о распространении плазменных моделей (ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1994) на нетрадиционную для них область конденсированных плотностей и мегабарных давлений, где до последнего времени применялись либо полуэмпирические аппроксимационные уравнения состояния (ФОРТОВ, ЯКУБОВ, 1994), либо далекие экстраполяции квазиклассических приближений (КАЛИТКИН, КУЗЬМИНА, 1975). Наличие такого рода термодинамических измерений в области перехода «металл–диэлектрик» позволило бы кроме того проверить гипотезу (ЛАНДАУ, ЗЕЛЬДОВИЧ, 1944) о связи металлизации с фазовым превращением первого рода в неупорядоченных средах.

Интересующий нас диапазон параметров сильнонеидеальной системы соответствует пониженным по сравнению с твердотельными значениям плотности ρ_0 и энергиям, превосходящим энергию связи атомов и молекул в твердом теле (~ 1 эВ на частицу). Для генерации таких состояний металлов использовалось ударно-волновое сжатие мелкодисперсных (пористых) металлов (ЖЕРНОКЛЕТОВ, 2003), что дает возможность увеличить эффекты необратимой диссипации энергии во фронте ударного разрыва и получить более высокие разогревы вещества. Для ряда металлов значение пористости $m = \rho_0/\rho_{00}$ (ρ_{00} — плотность пористого образца) лежало в диапазоне $1 \leq m < 30$, так что экспериментальные данные охватывали значительную область как по плотностям вещества за фронтом ударной волны, так и по температурам. Для никеля максимально возможные пористости ($m = 15, 20$ и 28) и давления ударного сжатия более 80 ГПа (ТРУНИН и др., 1989, ТРУНИН, СИМАКОВ, 1993) для меди это величины $m = 10$ (ГРЯЗНОВ и др., 1998), для железа $m = 20$ (АЛЬГШУЛЕР и др., 1989), для алюминия $m = 8$ (ТРУНИН и др., 2001).

Данная глава посвящена построению моделей неидеальной плазмы для описания ударно-сжатых пористых металлов, анализу эффектов влияния взаимодействия частиц на термодинамические функции неидеальной плазмы в условиях ударно-волнового нагружения и сопоставлению полученных в результате расчета данных с результатами эксперимента.

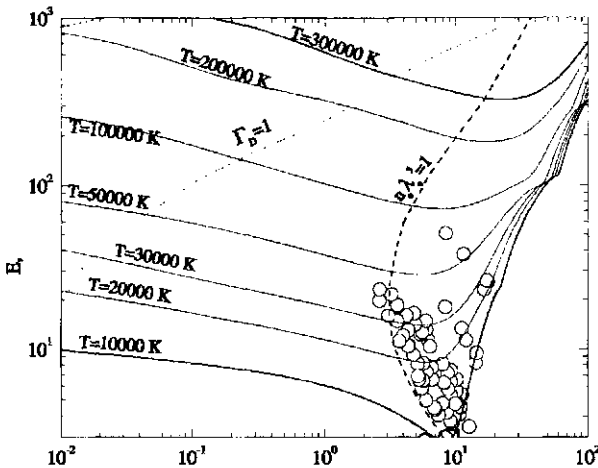


Рис. 9.1. Диаграмма — плотность—энергия для плазмы никеля. Изображены расчетные изотермы и экспериментальные точки, полученные в результате ударного сжатия сплошных и пористых образцов никеля (ТРУНИН, 1992, ГРЯЗНОВ и др., 1998). Отмечены линии постоянных параметра кулоновской неидеальности ($\Gamma_D = [4\pi(e^2/k_B T)^3 \sum n_\alpha z_\alpha^2]^{1/2}$) и параметра вырождения электронов — $n_e \lambda_e^3$

Для того, чтобы отметить общие особенности перечисленных выше экспериментальных данных по ударному сжатию пористых металлов рассмотрим, следуя (АЛЬТШУЛЕР и др., 1989), диаграмму внутренней энергии (E) — плотность (ρ), дополненную расчетом изотерм вещества с использованием какой-либо модели. На рис. 9.1 приведена E — ρ -диаграмма для никеля (ГРЯЗНОВ и др., 1996).

Она демонстрирует тот факт, что вся фазовая диаграмма вещества (диаграммы других металлов подобны обсуждаемой) распадается на две области качественно различного поведения термодинамических зависимостей. Большую часть занимает область относительно разреженной ($\rho \ll \rho_0$) «газовой» плазмы, характеризующейся двумя отличительными признаками — плавным убыванием энергии при изотермическом сжатии и отчетливым проявлением (на больших интервалах изменения плотности) т. наз. оболочечных осцилляций всех термодинамических зависимостей (см. подробнее ИОСИЛЕВСКИЙ, ГРЯЗНОВ, 1981). При $\rho > \rho_0$ такое поведение сменяется резким ростом энергии и обобщенного фактора сжимаемости — $Z(n_{nuc}, n_e, T) = P/P^{ideal}$, что традиционно интерпретируется как «ионизация давлением». Этот процесс в пределе очень высокой плотности завершается выходом в область состояний, хорошо описываемых моделью систе-

мы подвижных ядер, погруженных в слабонеидеальный газ вырожденных электронов. Для описания термодинамики в этой области успешно применим хорошо развитый аппарат ячеечных представлений (СИШЬКО, 1983, КИРЖИЦ и др., 1975, НИКИФОРОВ и др., 2000). Между двумя, указанными выше областями параметров, располагается переходная область, характеризующаяся минимальными значениями внутренней энергии и фактора сжимаемости и максимальным нарушением условий слабой неидеальности. Глубина и местоположение на изотермах минимумов соответствующих термическому и калорическому уравнению состояния, может условно рассматриваться как средоточие максимальной неопределенности нашего знания о термодинамических свойствах сжатого и нагретого вещества. Заметим, что область расположения минимумов соответствует так называемой «долины неидеальности» (см. гл. 4). Уникальность ударно-волнового сжатия пористых мишеней состоит в том, что оно дает информацию о поведении плотной сильно-неидеальной среды именно в этой, наиболее сложной и интересной области.

9.1. Термодинамическая модель. Эффекты вырождения электронов и взаимодействия частиц

В основе описания состояний ударно-сжатых пористых металлов лежал квазихимический подход (химическая модель) (ГРЯЗНОВ и др., 1980а, 1980б, 2000, 2004) облик черты которого рассматривались в предыдущих главах. Итак, свободная энергия для квазинейтральной смеси электронов, ионов, атомов и молекул, представляется как сумма идеально-газовых вкладов $F_{i,e}^o$ и совокупности всех компонент и членов ответственных за различные виды межчастичных взаимодействий, рассматриваемых в химической модели раздельно

$$F' \equiv \sum F_i^o + F_e^o + F_{n,i,e,ee}^* \quad (9.1.1)$$

Атомы и ионы подчиняются бoльцмановской статистике и их вклад имеет вид.

$$F_i^o = \sum_j N_j k_B T \left(\ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right) \quad (9.1.2)$$

(здесь k_B – константа Больцмана, σ_j – индивидуальная статсумма частицы j -го сорта (в данном случае атома или иона), вычисленная по уровням энергии, отсчитанным от основного состояния частицы, Λ_j – тепловая длина во лны де-Бройля j -го сорта частиц, A_j – энергия атомизации (разность

между энергией основного состояния частицы и энергией основных состояний составляющих ее атомов).

Эффекты электронного вырождения важны в рассматриваемой области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения для свободных электронов может достигать нескольких единиц.

$$n_e \Lambda_e^3 \approx 1.$$

Как было показано в предыдущих главах, в рамках квазихимического представления, где электроны разделены на два сорта — свободных и связанных — эффект вырождения прежде всего сказывается уже в рамках идеально-газового слагаемого, качественно меняя зависимость давления и химического потенциала от плотности. Основной эффект электронного вырождения в перестройке механизма неидеальности состоит в постепенном ослаблении участия электронов, по мере роста их вырождения, в механизме взаимного экранирования зарядов. Пределом этой тенденции при экстремальном сжатии вещества является «выключение» электронов из этого механизма и переход экранирования в системе ионов в разряд, описываемый т. наз. моделью ионной смеси (BAUS and HANSEN, 1980) — вариантом модели однокомпонентной плазмы. В нашем случае основным способом учета электронного вырождения являлся учет этого эффекта в рамках идеально-газового слагаемого свободной энергии, которое имело вид (5.3.2) (глава 5). В данном случае вырождение электронов приводило прежде всего к эффективному сдвигу ионизационного равновесия в сторону меньших степеней ионизации, а кроме того и к прямой поправке в уравнении состояния, соответствующей дополнительному эффективному отталкиванию.

Описание эффектов неидеальности в данной главе разбивалось на два этапа. В рамках одного из них, реализованного в виде кода SANA-3 (см. главу 5), и неоднократно применявшегося в приложениях (ГРЯЗНОВ и др., 1980a, 1980b, 1982, 1998, ГРЯЗНОВ, ФОРТОВ), используется «минимальный» набор шагов, позволявший в ряде случаев добиться в пределах экспериментальной точности удовлетворительного согласия с данными эксперимента по динамическому (ударно-волновому) сжатию различных веществ: инертных газов, цезия, высоко-пористых образцов металлов и т. д. Некоторая упрощенность этого подхода необходима для возможности эффективного включения процедуры расчета уравнения состояния в достаточно громоздкие газодинамические расчеты, предъявляющие высокие требования к выполнению всех вспомогательных вычислений.

В рамках этого сокращенного подхода использовались следующие приближения:

- Учет электронного вырождения ограничивается идеально-газовым слагаемым,
- Эффект кулоновской неидеальности учитывается в рамках т. наз. дебаевского (кольцевого) приближения в большом каноническом ансамбле (ЛИКАЛЬТЕР, 1969, ГРЯЗНОВ и др., 1973),
- При расчете внутренних статистических сумм возбуждения атомов и ионов учитывается только основное состояние,
- Учитывается интенсивное короткодействующее отталкивание атомов и ионов в рамках приближения смеси твердых шаров с существенно различающимися размерами атомов и ионов различной кратности.
- Атомы и ионы считаются «проницаемыми» для электронов, т. е. последние не включаются в сферу действия приближения твердых сфер и «не чувствуют» эффективного увеличения плотности из-за наличия у атомов и ионов собственного объема.
- Учитывается дополнительное короткодействующее притяжение атомов и ионов, обеспечивающее эффективное описание наличия энергии связи конденсированного вещества.

Одним из преимуществ обсуждаемого сокращенного описания с точки зрения количественных расчетов является принципиальное отсутствие в используемой форме учета кулоновской неидеальности и статсум возбуждения, возможности спонтанной потери системой термодинамической устойчивости (матрица $\|\partial\mu_i/\partial n_j\|$ положительно определена при любой степени сжатия плазмы (ГРЯЗНОВ и др., 1980а)). Специально проведенные расчеты с использованием для раздельного описания ионной неидеальности в т. наз. модели ионной смеси (BAUS and HANSEN, 1980), а электронной — как взаимодействующего электронного газа (ICHIMARU et al., 1987) («Сдвоенная модель ОКП» по терминологии (ИОСИЛЕВСКИЙ, 1980)) — данное приближение было использовано в работе (FÖRSTER and KALBAUM, 1992) для описания термодинамики неидеальной плазмы смеси водорода и гелия) показали, что диапазон параметров, достигаемых при ударном сжатии пористых образцов большинства металлов, попадает в область существования даваемой этим приближением аномалии типа фазового перехода («ван дер ваальсовых петель»), форма и положение которых существенно зависят от максимальной степени ионизации, допускаемой принятой расчетной процедурой (неустойчивость по степени ионизации). Подобная чувствительность УРС к выбору приближения, используемого для описания

кулоновской неидеальности, характерна именно в этом диапазоне параметров для подавляющего большинства предлагавшихся в литературе моделей кулоновской неидеальности.

Отметим еще раз, что в данной модели кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле (ЛИКАЛЬТЕР, 1969, ГРЯЗНОВ и др., 1973), обобщенного (см. формулы (5.3.5)–(5.3.6) в главе 5) на случай многократной ионизации. В этом случае параметр неидеальности $\tilde{\Gamma}_D$ в (5.3.6) отличается от обычного дебаевского параметра неидеальности Γ_D ($\Gamma_D^2 \equiv 4\pi[e^2/k_B T]^3 \sum n_\alpha z_\alpha^2$), а само приближение эквивалентно классическому приближению Дебая-Хюккеля в пределе ($\Gamma_D \Rightarrow 0$) и отличается от него заметно меньшими значениями соответствующих поправок в области умеренной и сильной неидеальности ($\Gamma \geq 1$).

9.1.1. Короткодействующее отталкивание атомов и ионов

Эффект перекрытия электронных оболочек атомов и ионов при высоких степенях сжатия ведет к появлению интенсивного отталкивания тяжелых частиц на коротких расстояниях. Этот эффект описывался в главе 5, приближением твердых сфер одинакового размера (формула Карнахана-Старлинга (CARNAHAN and STARLING, 1969)), так как его применение ограничивалось областью частичной первой ионизации. В данном случае вследствие возможности многократной ионизации этот эффект учитывается в рамках модели смеси твердых сфер различных радиусов. В непосредственных вычислениях использовалась т. наз. формула Мансури (MANSOORY et al., 1971).

$$\frac{\Delta F_{HSM}}{\sum_i N_i k_B T} \equiv f_{HSM}(\nu) = X \frac{\nu}{(1-\nu)^2} + 3Y \frac{\nu}{1-\nu} + (X-1) \ln(1-\nu); \quad (9.1.3)$$

$$\nu \equiv \frac{4\pi}{3} n \bar{r}^3; \quad \bar{r}^k \equiv \sum_i n_i r_i^k / \sum n_i; \quad k = 1, 2, 3; \quad (9.1.4)$$

$$X = (\bar{r}^2)^3 (\bar{r}^3)^{-2}; \quad Y = \bar{r}^2 \bar{r}^1 (\bar{r}^3)^{-1}.$$

Вклады в давление, энергию и химический потенциал следуют из (9.1.5), (9.1.6):

$$\frac{\Delta P_{HSM}}{\sum_i n_i k_B T} = \frac{\partial f_{HSM}(\nu)}{\partial \nu}; \quad \frac{\Delta \mu_i}{k_B T} = f_{HSM}(\nu) + \sum_j n_j \frac{\partial f_{HSM}(\nu)}{\partial n_i}; \quad (9.1.5)$$

$$\Delta E_{HSM} \equiv 0.$$

Для определения радиусов частиц, r_j , применялись две процедуры. В первой, для расчета электронной структуры атомов и ионов использовалось приближение ограниченного атома (ГРЯЗНОВ и др., 1980а, 1980b), в рамках которого атом (или ион) помещается в сферическую ячейку с жесткими стенками и с помощью метода Хартри-Фока рассчитывается электронная структура частицы при переменном радиусе атомной ячейки (см. главу 5). Результаты такого расчета показаны на рис. 9.2, где представлены сдвиги энергии основного состояния атома и ионов меди в зависимости от радиуса ячейки. Дальнейшее определение «эффективного» радиуса ячейки базируется на соотношении:

$$\Delta E(r_i) = \text{const} \cdot I_i,$$

где $\Delta E(r_i)$ — сдвиг энергии основного состояния, I_i — соответствующий потенциал ионизации и r_i — радиус атомной ячейки. В данном случае принималось $\text{const} = 1$.

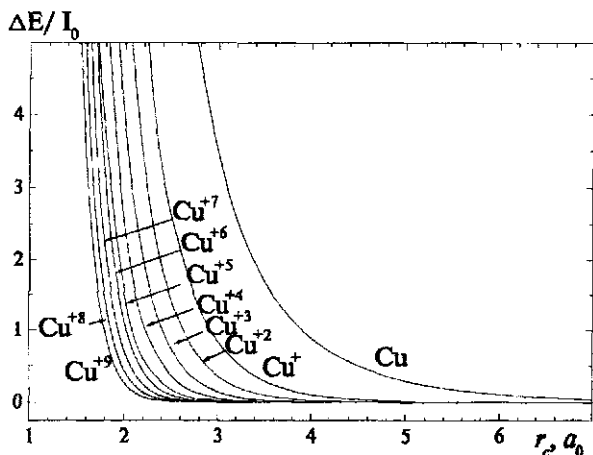


Рис. 9.2. Сдвиг энергии основных состояний атома меди и его ионов. Расчет методом Хартри-Фока

Более простая процедура (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1998) использует предположение о близости структуры атома к водородоподобной. В этом случае каждому иону ставится в соответствие характерный размер, связанный с потенциалом ионизации соотношением

$$r_i \approx r_0 [(z_i + 1)I_0/I_i], \quad (9.1.6)$$

где r_o , I_o — радиус и ионизационный потенциал атома, r_i , I_i — то же для i -го иона, z_i — заряд иона.

В реальных расчетах обе процедуры использовались только для определения *отношения* радиусов атома и остальных ионов. Опорная же величина *атомного радиуса* определялась в соответствии с т. наз. правилом Ашкрофта–Лекнера (ASHCROFT and LEKNER, 1966), согласно которому соответствующий нормальной плотности оптимальный размер твердых шаров определяется из условия фиксированного значения параметра упаковки:

$$\nu \equiv 4\pi \sum n_i r_i^3 / 3 \cong 0,45. \quad (9.1.7)$$

Согласно (ASHCROFT and LEKNER, 1966) такой выбор приводит к наилучшему совпадению положения первого максимума парной корреляционной функции системы твердых шаров с экспериментально наблюдаемой величиной для целого ряда простых металлов в жидком состоянии.

9.1.2. Дополнительное притяжение

Вычисления в рамках приближения (9.1.1)–(9.1.9), проводившиеся ранее (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1996) приводят к вполне приемлемому согласию с экспериментальными ударными адиабатами металлов при относительно больших скоростях ударных волн, и соответственно, высоких давлениях и температурах. Учет короткодействующего отталкивания принципиален для достижения этого согласия. Однако проведенные расчеты выявили существование области относительно низких давлений (ГРЯЗНОВ и др., 1995), соответствующих низким скоростям ударных волн, в которой приближение (9.1.1)–(9.1.9) в принципе не позволяет получить решение уравнения Рэнкина–Гюгонно (ЗЕЛЬДОВИЧ, РАЙЗЕР, 1968) для ударной адиабаты ни при каком наборе радиусов $\{r_i\}$. Это связано с тем, что (9.1.1)–(9.1.7) не содержит механизма, учитывающего энергию связи, ответственную за существование конденсированного состояния вещества. Для улучшения экстраполяционных свойств приближения (9.1.1)–(9.1.7) при описании нижних участков ударных адиабат это приближение было дополнено членами, эффективно учитывающими наличие вышеупомянутой энергии связи в виде:

$$\begin{aligned} \Delta F = \Delta U = -A \left(\sum N_i \right)^{1+\delta} \cdot V^{-\delta}; & \quad \Delta P = \delta(\Delta U/V); \\ \Delta \mu_i = -A(1 + \delta) V^{-\delta} \left(\sum N_i \right)^{\delta}; & \quad A, \delta = \text{const.} \end{aligned} \quad (9.1.8)$$

Поправки (9.1.8) не зависят от температуры. Выбор $\delta = 1$ соответствует традиционной форме приближения ван дер Ваальса. Выбор же $\delta = 1/3$

считается более соответствующим «металлическому» (плазменному) типу связи конденсированного вещества. В этом случае суммирование ведется по всем тяжелым частицам, так что поправки (9.1.8) не сдвигают ионизационного равновесия. Согласно утверждению работ (ЛИКАЛЬТЕР, 1992) именно такой показатель степени соответствует виду эффективного притяжения в «расширенных» металлах, т.е. металлах при промежуточных плотностях, соответствующих плотности в критической точке перехода газ-жидкость.

9.2. Сравнение экспериментальных и расчетных данных

Результаты расчетов ударных адиабат для пористых никеля, меди и железа с использованием описанной выше модели уравнения состояния (9.1.1)–(9.1.8) представлены на последующих рисунках.

На рис. 9.3 приведены ударные адиабаты пористого никеля, рассчитывавшиеся ранее в работах (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1996), и сопоставлявшиеся там с имевшимися ранее экспериментальными данными (см. (ТРУНИН, 1992)). Это сравнение пополнено в данной работе результатами дополнительных измерений для пористости $m = 15$ и 20 (ГРЯЗНОВ и др., 1998), а так же новейшими экспериментальными данными для высокопористых образцов ($m = 20$ и 28) (ТРУНИН и др., 2001). Обращает на себя внимание, что новые экспериментальные данные хорошо совпадают с результатами предыдущих расчетов. На рис. 9.3 также приведены результаты сравнения для адиабат с низкой пористостью (включая сплошную адиабату). Цель этого общего сравнения – показать, что квазихимическое представление даже в описанном выше сокращенном варианте вполне удовлетворительно описывает в целом весь набор экспериментально измеренных ударных адиабат никеля.

На рис. 9.4 представлены результаты методических расчетов, иллюстрирующие влияние на конечные результаты отдельных составляющих принятой методики термодинамического расчета в рамках модели (9.1.1)–(9.1.8).

Рис 9.4 демонстрирует тот факт, что поведение расчетных ударных адиабат в области относительно низких давлений принципиально требует одновременного присутствия в модели интенсивного отталкивания одновременно с эффективным притяжением тяжелых частиц.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных для ударных адиабат железа приведено на рис. 9.5. Как и для никеля, для железа можно констатировать, что вполне удовлетворительное соответствие результатов

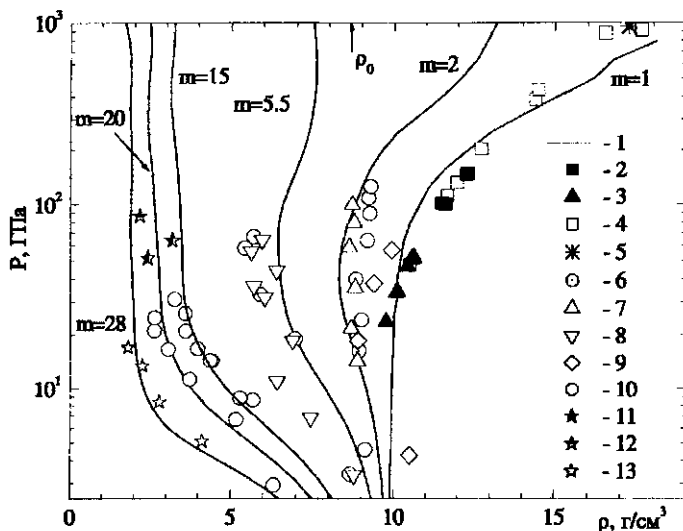


Рис. 9.3. Ударные адиабаты пористого никеля. Данные расчета: 1 — расчет согласно (9.1.1)–(9.1.8), суммирование в (9.1.8) по всем тяжелым частицам; Экспериментальные данные: 2 — (McQUEEN and MARSH, 1960), 3 — (WALSH et al., 1957), 4 — (АЛЬТШУЛЕР и др., 1962), 5 — (КОРМЕР и др. 1962), 6 — (ТРУНИН и др. 1989) ($m = 2$), 7 — (ТРУНИН и др. 1989) ($m = 2, 32$); 8 — (ТРУНИН и др. 1989) ($m = 5, 62$), 9 — (АЛЕКСЕЕВ и др., 1971), 10 — (ТРУНИН, СИМАКОВ, 1993), 11 — (ГРЯЗНОВ и др., 1998), 12 — (ТРУНИН и др. 2001) ($m = 20$), 13 — (ТРУНИН и др. 2001) ($m = 28$)

теории и эксперимента при высоких пористостях (и максимально достигнутых степенях расширения первоначально конденсированного металла), постепенно ухудшается по мере продвижения в область все более и более плотной плазмы, достигаемых в опытах со сжатием низкопористых образцов. Заметим, что использованные в расчетной модели при описании новых экспериментальных данных параметры отталкивания (сочетание собственных размеров частиц) и притяжения, выбирались по той же схеме, что и в ранее выполненных расчетах (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1996).

В таблице 9.1 приведены значения радиусов атомов и ионов, использованных в расчетах данной работы для меди, никеля и железа.

Аналогичные расчеты были проведены и для пористой меди. Сравнение расчетных и экспериментальных данных для ударно-сжатой меди представлено на рис. 9.6. Заметим, что на рис. 9.6, как и в предыдущих случаях,

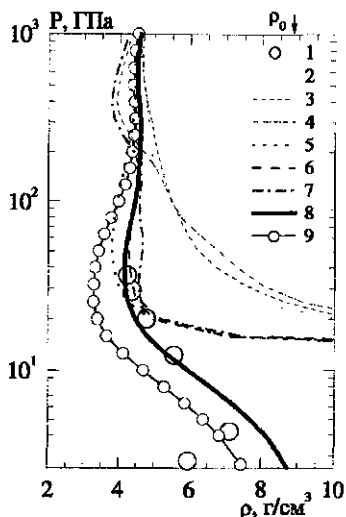


Рис. 9.4. Ударные адиабаты пористого никеля для $m = 3$. Сравнение различных вариантов модели. 1 — эксперимент, 2 — идеальная плазма, атомы в основном состоянии, 3 — то же, что 2 + кулоновское взаимодействие, 4 — то же, что 3 + статсуммы по Планку-Ларкину (PLANCK, 1924, ЛАРКИН, 1960), 5, 6, 7 — то же, что 2, 3, 4 + твердые сферы (9.1.3)–(9.1.7), 8 — (9.1.1)–(9.1.8) $\delta = 1$, только атомы при суммировании (9.1.8), 9 — то же, что 8 + радиусы частиц увеличены на 20%

полученные прежде (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1996) результаты дополнены новыми экспериментальными данными (ГРЯЗНОВ и др., 1998, ТРУНИН и др., 2001). В целом сравнение расчетных и экспериментальных данных для никеля, железа и меди показывает, что при использовании даже предельно упрощенного приближения, квазихимическое представление позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные по ударному сжатию образцов достаточно высокой пористости. Подтверждением этого является тот факт, что среди приведенных на рис. 9.6 результатов две экспериментальные точки, соответствующие максимальным давлениям на адиабатах с $m = 15$ и $m = 20$ были опубликованы (ГРЯЗНОВ и др., 1998, ТРУНИН и др., 2001) после проведения основной процедуры расчета ударных адиабат пористого никеля, результаты которых представлены на рис. 9.4.

Хорошее совпадение новых данных с результатами ранее проведенных расчетов служит дополнительным доказательством правильности исходных предположений, заложенных в процедуру расчета на основе обобщенной хи-

Таблица 9.1

$Z^{(i)}$	0	1	2	3	4	5	6	7
Cu	2.00	1.700	1.55	1.40	1.25	1.10	0.95	0.8
Ni	2.00	1.684	1.27	1.10	1.00	0.84	0.80	
Fe	2.27	2.00	1.58	1.18	1.075	0.978	0.904	

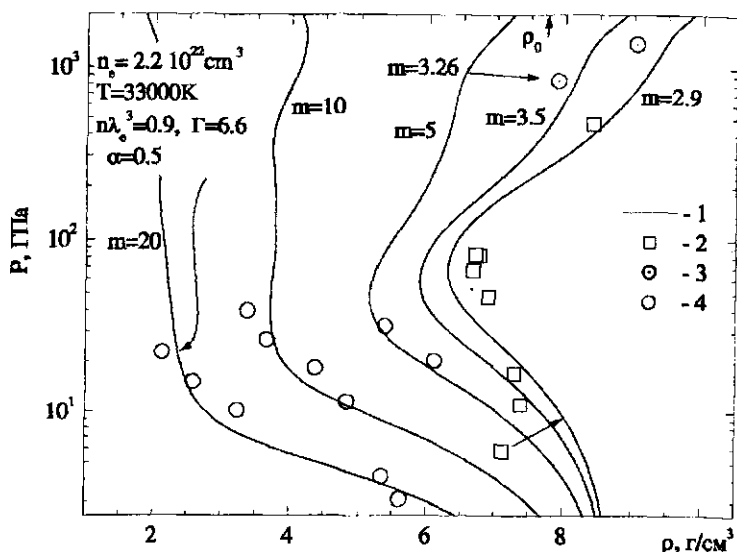


Рис. 9.5. Ударные адиабаты пористого железа. 1 – расчет согласно (9.1.1)–(9.1.8), суммирование в (9.1.8) по всем тяжелым частицам; 2 – экспериментальные данные (ТРУНИН и др., 1989) ($m = 2.9$), 3 – экспериментальные данные (ТРУНИН и др., 1989); 4 – (ГРЯЗНОВ и др., 1998)

мической 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 достигнутых (для ударно сжатой плазмы никеля) температурам и степеням ионизации. В то же время, как уже было сказано выше, экстраполяционные возможности химической модели при одних и тех же давлениях постепенно

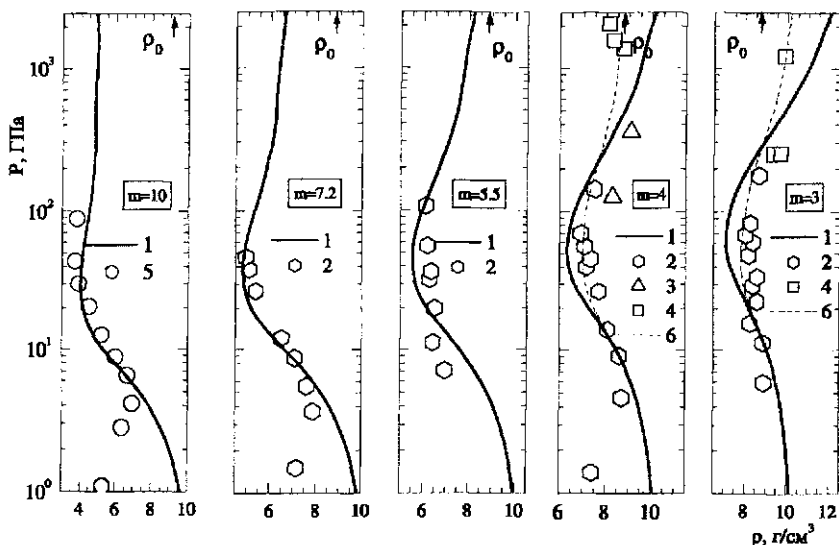


Рис. 9.6. Ударные адиабаты пористой меди. 1 -- расчет согласно (9.1.1)–(9.1.8), суммирование в (9.1.8) по всем тяжелым частицам; 2 -- эксперимент (ТРУНИН и др., 1989), 3 -- эксперимент (КОРМЕР и др., 1962), 4 -- эксперимент (ЗУБАРЕВ и др., 1978), 5 -- эксперимент (ГРЯЗНОВ и др., 1998), 6 -- расчет (ГРЯЗНОВ и др., 1982) по модели (9.1.1)–(9.1.8) с измененными радиусами атома и ионов ($r_a = 2.0a_0$, r_c ($\text{Cu}^{+4} - \text{Cu}^{+7} = 1.75a_0$))

ухудшаются по мере продвижения в область адиабат меньшей пористости и соответственно более высоких плотностей.

Итак можно констатировать удовлетворительное, в целом, соответствие теории и эксперимента. Вместе с тем обращает на себя внимание расхождение расчетных и экспериментальных ударных для случая адиабаты с $m = 10$ (рис. 9.6) в верхней части экспериментально достигнутого диапазона давлений. Анализируя причину этого расхождения, следует принять во внимание очевидную упрощенность теоретической модели, описывающей взаимодействие в системе, и крайнюю чувствительность получаемых с ее помощью результатов к конкретному выбору сочетания собственных размеров частиц. Сказанное подтверждается результатами дополнительных расчетов, проведенных с несколько измененным (увеличенным) набором радиусов, также приведенным на рис. 9.5. Они показывают, что полученное ранее различие экспериментальных и расчетных данных лежит в пределах

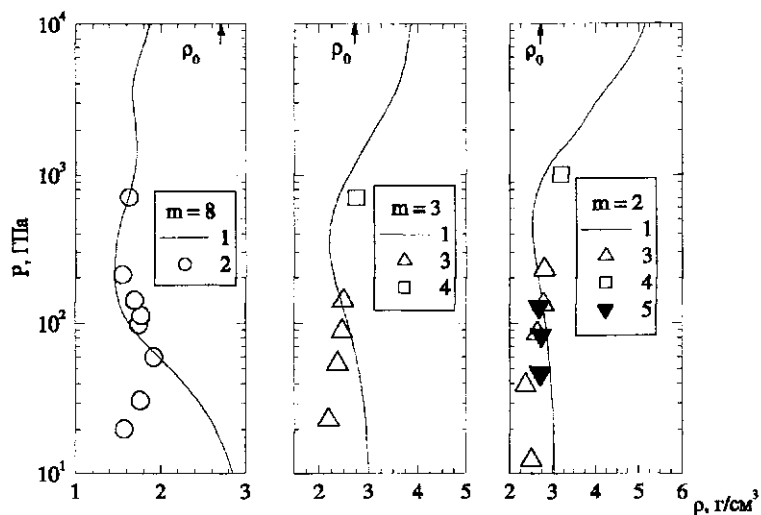


Рис. 9.7. Ударные адиабаты пористого алюминия ($m \equiv \rho_0/\rho_{00}$ — исходная пористость экспериментальных образцов) 1. — вычисления согласно модели (9.1.1)–(9.1.8), (9.2.1). Суммирование в (9.1.8) по атомам; 2 — эксперимент (ТРУНИН и др., 2001); 3 — эксперимент (БАКАНОВА и др., 1974); 4 — эксперимент (КОРМЕР и др., 1962). 5 — эксперимент (VAN THIEL, 1977)

естественной неопределенности химической модели в рассматриваемой области параметров. В частности, ранее (ГРЯЗНОВ и др., 1982, ГРЯЗНОВ и др., 1995) уже отмечалась особенность поведения ударных данных на пористых адиабатах меди с $m = 3$ и $m = 4$ (рис. 9.6), требующая для своего описания модельного уравнения состояния с эффективно более высокой «жесткостью» (кривая б), нежели та, что дается выбранным в (ГРЯЗНОВ и др., 1995, 1996) набором собственных размеров. Таким образом можно заключить, что модельное описание термодинамики ударно-сжатого вещества менее универсально и требует большей степени учета индивидуальных особенностей каждого конкретного металла (например, его электронной структуры), чем это предполагается при построении упрощенной методики.

Заметим, что упрощенная схема выбора относительного размера атома и ионов, дающая удовлетворительные результаты для описания ударно-сжатых пористых железа, никеля и меди не позволяет добиться сколь угодно приемлемых результатов при описании ударных адиабат пористого алюминия. Поэтому описанная выше упрощенная процедура определения отношения атомных и ионных радиусов была модернизирована. В каче-

стве исходных данных для вычисления этого отношения использовались результаты расчета их электронной структуры методом Хартри–Фока (см. главу 5). При этом вычислялся средний радиус по всем электронным оболочкам с использованием их чисел заполнения q_{nl} и радиальных волновых функций $f_{nl}(r)$ для атома и всех ионов

$$\langle r \rangle = \sum_{nl} \int_0^{\infty} r q_{nl} f_{nl}^2(r) dr. \quad (9.2.1)$$

Отношения атомных и ионных радиусов, которые были получены с использованием (9.2.1) применялись в качестве исходных параметров в термодинамической модели (9.1.1)–(9.1.8).

Еще одной проблемой традиционно находящейся в центре внимания теории неидеальной плазмы, является вопрос о существовании самостоятельного «плазменного» фазового перехода, отдельного от известного перехода газ-жидкость в металлах (НОРМАН, СТАРОСТИН, 1970, ЭБЕЛИНИ и др., 1979). Результаты настоящих экспериментов не зафиксировали каких-либо газодинамических аномалий, ассоциируемых с наличием в системе неизвестного фазового перехода. Следует подчеркнуть, что и приближения (9.1.1)–(9.1.8), (9.2.1) использованное в расчетах настоящей работы, также не содержат таких аномалий.

ГЛАВА 10

Таблицы термодинамических свойств

В данной главе содержится семь таблиц термодинамических свойств для следующих элементов: алюминия (Al), железа (Fe), меди (Cu), золота (Au), свинца (Pb), висмута (Bi) и урана (U). В каждой таблице представлены значения среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ в зависимости от плотности ρ и температуры T . Значения плотности варьируются в пределах от $0,001 \text{ г см}^{-3}$ до 100 г см^{-3} . Значения температуры варьируются от 100 К до 100 000 000 К. Логарифмический шаг приращения для обоих параметров равен 0,5.

Расчет табличных данных проводился на основе широкодиапазонных моделей, подробно описанных в главе 6. Средняя степень ионизации рассчитана на базе обобщенной химической модели (см. раздел 6.4). Теоретический подход для расчета электро- и теплопроводности рассмотрен в разделе 6.5.

Вычислив среднюю погрешность численных результатов относительно экспериментальных данных для разных областей фазовой диаграммы, мы сделали вывод, что она составляет 100%-200%.

10.1. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ алюминия (Al) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,100E+01	0,2891E+04	0,8227E+05
0,100E+01	0,100E+03	0,200E+01	0,4895E+05	0,1390E+07
0,316E+01	0,100E+03	0,300E+01	0,4492E+06	0,1274E+08
0,100E+02	0,100E+03	0,300E+01	0,1708E+07	0,4845E+08
0,316E+02	0,100E+03	0,500E+01	0,1996E+08	0,5661E+09
0,100E+03	0,100E+03	0,100E+02	0,3439E+09	0,9752E+10
0,316E+03	0,100E+03	0,110E+02	0,1652E+10	0,4684E+11
0,100E+04	0,100E+03	0,120E+02	0,7983E+10	0,2264E+12
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,580E-14	0,2372E-10	0,1064E-08
0,316E+00	0,316E+03	0,100E+01	0,1068E+04	0,9660E+05
0,100E+01	0,316E+03	0,200E+01	0,1606E+05	0,1444E+07
0,316E+01	0,316E+03	0,300E+01	0,1439E+06	0,1291E+08
0,100E+02	0,316E+03	0,300E+01	0,5444E+06	0,4881E+08
0,316E+02	0,316E+03	0,500E+01	0,6330E+07	0,5674E+09
0,100E+03	0,316E+03	0,100E+02	0,1089E+09	0,9757E+10
0,316E+03	0,316E+03	0,110E+02	0,5228E+09	0,4685E+11
0,100E+04	0,316E+03	0,120E+02	0,2527E+10	0,2264E+12
0,100E-02	0,100E+04	0,627E-14	0,1441E-10	0,2046E-08
0,316E-02	0,100E+04	0,357E-14	0,8206E-11	0,1165E-08
0,100E-01	0,100E+04	0,283E-14	0,6505E-11	0,9235E-09
0,316E-01	0,100E+04	0,167E-12	0,3839E-09	0,5450E-07
0,100E+00	0,100E+04	0,149E-04	0,3370E-01	0,4818E+01
0,316E+00	0,100E+04	0,100E+01	0,5094E+03	0,1474E+06
0,100E+01	0,100E+04	0,200E+01	0,5658E+04	0,1623E+07
0,316E+01	0,100E+04	0,300E+01	0,4722E+05	0,1346E+08
0,100E+02	0,100E+04	0,300E+01	0,1758E+06	0,4998E+08
0,316E+02	0,100E+04	0,500E+01	0,2013E+07	0,5713E+09
0,100E+03	0,100E+04	0,100E+02	0,3446E+08	0,9774E+10
0,316E+03	0,100E+04	0,110E+02	0,1653E+09	0,4689E+11
0,100E+04	0,100E+04	0,120E+02	0,7987E+09	0,2265E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,104E-03	0,1319E+00	0,5921E+02
0,316E-02	0,316E+04	0,594E-04	0,7601E-01	0,3412E+02
0,100E-01	0,316E+04	0,377E-04	0,4844E-01	0,2175E+02
0,316E-01	0,316E+04	0,980E-04	0,1250E+00	0,5628E+02
0,100E+00	0,316E+04	0,353E-01	0,2001E+02	0,1172E+05
0,316E+00	0,316E+04	0,100E+01	0,3889E+03	0,3528E+06
0,100E+01	0,316E+04	0,200E+01	0,2430E+04	0,2238E+07
0,316E+01	0,316E+04	0,300E+01	0,1676E+05	0,1523E+08
0,100E+02	0,316E+04	0,300E+01	0,5954E+05	0,5374E+08
0,316E+02	0,316E+04	0,500E+01	0,6499E+06	0,5840E+09
0,100E+03	0,316E+04	0,100E+02	0,1096E+06	0,9827E+10
0,316E+03	0,316E+04	0,110E+02	0,5245E+08	0,4701E+11
0,100E+04	0,316E+04	0,120E+02	0,2531E+09	0,2268E+12
0,100E-02	0,100E+05	0,304E+00	0,5437E+02	0,7904E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,193E+00	0,5110E+02	0,7529E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,124E+00	0,4521E+02	0,6802E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,124E+00	0,5044E+02	0,8039E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,470E+00	0,1523E+03	0,3155E+06
0,316E+00	0,100E+05	0,100E+01	0,5021E+03	0,1311E+07
0,100E+01	0,100E+05	0,200E+01	0,1576E+04	0,4646E+07
0,316E+01	0,100E+05	0,300E+01	0,7301E+04	0,2142E+08
0,100E+02	0,100E+05	0,300E+01	0,2297E+05	0,6642E+08
0,316E+02	0,100E+05	0,500E+01	0,2185E+06	0,6248E+09
0,100E+03	0,100E+05	0,100E+02	0,3516E+07	0,9997E+10
0,316E+03	0,100E+05	0,110E+02	0,1670E+08	0,4740E+11
0,100E+04	0,100E+05	0,120E+02	0,8026E+08	0,2277E+12
0,100E-02	0,316E+05	0,147E+01	0,2530E+03	0,1516E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,121E+01	0,3215E+03	0,1730E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,995E+00	0,4124E+03	0,1989E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,848E+00	0,4062E+03	0,2074E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,855E+00	0,5071E+03	0,2881E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,104E+01	0,9890E+03	0,6751E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,201E+01	0,1788E+04	0,1604E+08
0,316E+01	0,316E+05	0,300E+01	0,4883E+04	0,4612E+08
0,100E+02	0,316E+05	0,300E+01	0,1220E+05	0,1140E+09
0,316E+02	0,316E+05	0,500E+01	0,8306E+05	0,7616E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,100E+02	0,1166E+07	0,1054E+11
0,316E+03	0,316E+05	0,110E+02	0,5407E+07	0,4864E+11
0,100E+04	0,316E+05	0,120E+02	0,2569E+08	0,2306E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,300E+01	0,7153E+03	0,1800E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,296E+01	0,8320E+03	0,2090E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,288E+01	0,9965E+03	0,2496E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,268E+01	0,1249E+04	0,3095E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,232E+01	0,1656E+04	0,4010E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,207E+01	0,2280E+04	0,5550E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,244E+01	0,3312E+04	0,8931E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,300E-01	0,5792E+04	0,1694E+09
0,100E+02	0,100E+06	0,303E+01	0,1122E+05	0,3351E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,501E+01	0,4278E+05	0,1276E+10
0,100E+03	0,100E+06	0,100E+02	0,4243E+06	0,1233E+11
0,316E+03	0,100E+06	0,110E+02	0,1836E+07	0,5266E+11
0,100E+04	0,100E+06	0,120E+02	0,8419E+07	0,2400E+12
0,100E-02	0,316E+06	0,627E+01	0,1932E+04	0,1789E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,541E+01	0,2390E+04	0,2163E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,482E+01	0,2932E+04	0,2602E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,439E+01	0,3605E+04	0,3150E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,400E+01	0,4525E+04	0,3901E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,361E+01	0,5874E+04	0,5009E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,326E+01	0,7970E+04	0,6793E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,326E+01	0,1136E+05	0,1002E+10
0,100E+02	0,316E+06	0,358E+01	0,1807E+05	0,1679E+10
0,316E+02	0,316E+06	0,507E+01	0,3791E+05	0,3657E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,100E+02	0,1972E+06	0,1870E+11
0,316E+03	0,316E+06	0,110E+02	0,7166E+06	0,6628E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,120E+02	0,2975E+07	0,2708E+12
0,100E-02	0,100E+07	0,110E+02	0,5654E+04	0,1768E+10
0,316E-02	0,100E+07	0,110E+02	0,6377E+04	0,1994E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,109E+02	0,7362E+04	0,2301E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,106E+02	0,8764E+04	0,2733E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,974E+01	0,1094E+05	0,3385E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,839E+01	0,1425E+05	0,4352E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,724E+01	0,1902E+05	0,5734E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,578E+01	0,2676E+05	0,7909E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,510E+01	0,3868E+05	0,1143E+11
0,316E+02	0,100E+07	0,600E+01	0,6044E+05	0,1850E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,101E+02	0,1490E+06	0,4637E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,110E+02	0,3908E+06	0,1187E+12
0,100E+04	0,100E+07	0,120E+02	0,1287E+07	0,3802E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ^{0,5}
0,100E-02	0,316E+07	0,130E+02	0,2181E+05	0,2185E+11
0,316E-02	0,316E+07	0,129E+02	0,2409E+05	0,2412E+11
0,100E-01	0,316E+07	0,127E+02	0,2703E+05	0,2703E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,122E+02	0,3119E+05	0,3109E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,116E+02	0,3671E+05	0,3645E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,112E+02	0,4358E+05	0,4317E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,110E+02	0,5268E+05	0,5216E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,108E+02	0,6627E+05	0,6563E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,103E+02	0,8877E+05	0,8790E+11
0,316E+02	0,316E+07	0,930E+01	0,1280E+06	0,1264E+12
0,100E+03	0,316E+07	0,105E+02	0,2041E+06	0,2039E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,110E+02	0,3779E+06	0,3752E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,120E+02	0,8686E+06	0,8441E+12
0,100E-02	0,100E+08	0,130E+02	0,1007E+06	0,3194E+12
0,316E-02	0,100E+08	0,130E+02	0,1086E+06	0,3442E+12
0,100E-01	0,100E+08	0,130E+02	0,1178E+06	0,3734E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,130E+02	0,1287E+06	0,4082E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,130E+02	0,1421E+06	0,4507E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,130E+02	0,1589E+06	0,5040E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,130E+02	0,1807E+06	0,5733E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,129E+02	0,2113E+06	0,6703E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,127E+02	0,2563E+06	0,8130E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,122E+02	0,3287E+06	0,1042E+13
0,100E+03	0,100E+08	0,115E+02	0,4508E+06	0,1428E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,114E+02	0,6646E+06	0,2109E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,123E+02	0,1109E+07	0,3514E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,130E+02	0,4847E+06	0,4856E+13
0,316E-02	0,316E+08	0,130E+02	0,5164E+06	0,5174E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,130E+02	0,5526E+06	0,5537E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,130E+02	0,5944E+06	0,5955E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,130E+02	0,6433E+06	0,6445E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,130E+02	0,7012E+06	0,7026E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,130E+02	0,7715E+06	0,7731E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,130E+02	0,8590E+06	0,8609E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,130E+02	0,9724E+06	0,9750E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,130E+02	0,1127E+07	0,1131E+14
0,100E+03	0,316E+08	0,129E+02	0,1361E+07	0,1367E+14
0,316E+03	0,316E+08	0,128E+02	0,1733E+07	0,1744E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,127E+02	0,2391E+07	0,2410E+14

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+09	0,130E+02	0,2401E+07	0,7612E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,130E+02	0,2538E+07	0,3047E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,130E+02	0,2692E+07	0,8536E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,130E+02	0,2866E+07	0,9087E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,130E+02	0,3064E+07	0,9715E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,130E+02	0,3292E+07	0,1044E+15
0,100E+01	0,100E+09	0,130E+02	0,3557E+07	0,1128E+15
0,316E+01	0,100E+09	0,130E+02	0,3871E+07	0,1228E+15
0,100E+02	0,100E+09	0,130E+02	0,4252E+07	0,1348E+15
0,316E+02	0,100E+09	0,130E+02	0,4727E+07	0,1499E+15
0,100E+03	0,100E+09	0,130E+02	0,5346E+07	0,1697E+15
0,316E+03	0,100E+09	0,130E+02	0,6205E+07	0,1972E+15
0,100E+04	0,100E+09	0,129E+02	0,7540E+07	0,2399E+15

10.2. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ железа (Fe) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,8053E+04	0,2290E+06
0,316E+01	0,100E+03	0,200E+01	0,1391E+06	0,3947E+07
0,100E+02	0,100E+03	0,400E+01	0,2437E+07	0,6914E+08
0,316E+02	0,100E+03	0,600E+01	0,2239E+08	0,6350E+09
0,100E+03	0,100E+03	0,900E+01	0,2061E+09	0,5843E+10
0,316E+03	0,100E+03	0,160E+02	0,2731E+10	0,7745E+11
0,100E+04	0,100E+03	0,170E+02	0,1209E+11	0,3427E+12
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,133E-21	0,5439E-18	0,2440E-16
0,100E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,2799E+04	0,2527E+06
0,316E+01	0,316E+03	0,200E+01	0,4501E+05	0,4046E+07
0,100E+02	0,316E+03	0,400E+01	0,7757E+06	0,6958E+08
0,316E+02	0,316E+03	0,600E+01	0,7101E+07	0,6365E+09
0,100E+03	0,316E+03	0,900E+01	0,6526E+08	0,5848E+10
0,316E+03	0,316E+03	0,160E+02	0,8646E+09	0,7747E+11
0,100E+04	0,316E+03	0,170E+02	0,3825E+10	0,3428E+12
0,100E-02	0,100E+04	0,487E-19	0,1119E-15	0,1589E-13
0,316E-02	0,100E+04	0,269E-19	0,6184E-16	0,8778E-14
0,100E-01	0,100E+04	0,153E-19	0,3517E-16	0,4993E-14
0,316E-01	0,100E+04	0,127E-19	0,2919E-16	0,4144E-14
0,100E+00	0,100E+04	0,227E-17	0,5218E-14	0,7407E-12
0,316E+00	0,100E+04	0,602E-07	0,1384E-03	0,1965E-01
0,100E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,1155E+04	0,3335E+06
0,316E+01	0,100E+04	0,200E+01	0,1524E+05	0,4362E+07
0,100E+02	0,100E+04	0,400E+01	0,2495E+06	0,7099E+08
0,316E+02	0,100E+04	0,600E+01	0,2258E+07	0,6410E+09
0,100E+03	0,100E+04	0,900E+01	0,2067E+08	0,5863E+10
0,316E+03	0,100E+04	0,160E+02	0,2734E+09	0,7753E+11
0,100E+04	0,100E+04	0,170E+02	0,1209E+10	0,3429E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ³ В ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,457E-05	0,5903E-02	0,2648E+01
0,316E-02	0,316E+04	0,260E-05	0,3360E-02	0,1507E+01
0,100E-01	0,316E+04	0,147E-05	0,1900E-02	0,8525E+00
0,316E-01	0,316E+04	0,935E-06	0,1209E-02	0,5423E+00
0,100E+00	0,316E+04	0,334E-05	0,4316E-02	0,1937E+01
0,316E+00	0,316E+04	0,740E-02	0,6953E+01	0,3629E+04
0,100E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,6964E+03	0,6361E+06
0,316E+01	0,316E+04	0,200E+01	0,5900E+04	0,5410E+07
0,100E+02	0,316E+04	0,400E+01	0,8341E+05	0,7549E+08
0,316E+02	0,316E+04	0,600E+01	0,7286E+06	0,6555E+09
0,100E+03	0,316E+04	0,900E+01	0,6585E+07	0,5909E+10
0,316E+03	0,316E+04	0,160E+02	0,8669E+08	0,7772E+11
0,100E+04	0,316E+04	0,170E+02	0,3830E+09	0,3433E+12
0,100E-02	0,100E+05	0,214E+00	0,4471E+02	0,6422E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,131E+00	0,3990E+02	0,5767E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,789E-01	0,3259E+02	0,4756E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,490E-01	0,2498E+02	0,3700E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,548E-01	0,2891E+02	0,4499E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,410E+00	0,1582E+03	0,3406E+06
0,100E+01	0,100E+05	0,100E+01	0,7207E+03	0,1949E+07
0,316E+01	0,100E+05	0,200E+01	0,3117E+04	0,9190E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,400E+01	0,3096E+05	0,9017E+08
0,316E+02	0,100E+05	0,600E+01	0,2445E+06	0,7018E+09
0,100E+03	0,100E+05	0,900E+01	0,2126E+07	0,6058E+10
0,316E+03	0,100E+05	0,160E+02	0,2758E+08	0,7832E+11
0,100E+04	0,100E+05	0,170E+02	0,1214E+09	0,3445E+12
0,100E-02	0,316E+05	0,179E+01	0,2151E+03	0,1420E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,156E+01	0,2659E+03	0,1652E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,129E+01	0,3401E+03	0,1925E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,104E+01	0,4478E+03	0,2273E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,874E+00	0,4654E+03	0,2463E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,930E+00	0,6760E+03	0,4079E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,127E+01	0,1246E+04	0,9614E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,202E+01	0,2781E+04	0,2537E+08
0,100E+02	0,316E+05	0,400E+01	0,1490E+05	0,1408E+09
0,316E+02	0,316E+05	0,600E+01	0,9219E+05	0,8528E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,900E+01	0,7189E+06	0,6533E+10
0,316E+03	0,316E+05	0,160E+02	0,8908E+07	0,8022E+11
0,100E+04	0,316E+05	0,170E+02	0,3881E+08	0,3485E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,414E+01	0,5747E+03	0,1564E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,392E+01	0,6894E+03	0,1856E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,355E+01	0,8555E+03	0,2257E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,293E+01	0,1108E+04	0,2798E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,233E+01	0,1475E+04	0,3520E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,197E+01	0,1991E+04	0,4618E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,191E+01	0,2775E+04	0,6729E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,223E+01	0,4338E+04	0,1173E+09
0,100E+02	0,100E+06	0,401E+01	0,1140E+05	0,3441E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,602E+01	0,4593E+05	0,1388E+10
0,100E+03	0,100E+06	0,901E+01	0,2757E+06	0,8112E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,160E+02	0,2998E+07	0,8631E+11
0,100E+04	0,100E+06	0,170E+02	0,1265E+08	0,3612E+12
0,100E-02	0,316E+06	0,887E+01	0,1529E+04	0,1479E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,823E+01	0,1850E+04	0,1774E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,771E+01	0,2267E+04	0,2159E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,710E+01	0,2848E+04	0,2687E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,632E+01	0,3683E+04	0,3428E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,541E+01	0,4896E+04	0,4475E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,457E+01	0,6716E+04	0,6037E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,408E+01	0,9661E+04	0,8696E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,446E+01	0,1584E+05	0,1484E+10
0,316E+02	0,316E+06	0,624E+01	0,3781E+05	0,3684E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,907E+01	0,1426E+06	0,1376E+11
0,316E+03	0,316E+06	0,160E+02	0,1138E+07	0,1061E+12
0,100E+04	0,316E+06	0,170E+02	0,4397E+07	0,4022E+12
0,100E-02	0,100E+07	0,160E+02	0,4332E+04	0,1394E+10
0,316E-02	0,100E+07	0,160E+02	0,5027E+04	0,1617E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,160E+02	0,6001E+04	0,1931E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,158E+02	0,7441E+04	0,2393E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,149E+02	0,9612E+04	0,3080E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,128E+02	0,1272E+05	0,4034E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,109E+02	0,1717E+05	0,5385E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,873E+01	0,2361E+05	0,7284E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,729E+01	0,3394E+05	0,1036E+11
0,316E+02	0,100E+07	0,731E+01	0,5476E+05	0,1691E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,950E+01	0,1232E+06	0,3865E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,160E+02	0,5673E+06	0,1745E+12
0,100E+04	0,100E+07	0,170E+02	0,1809E+07	0,5398E+12

10.2. ЖЕЛЕЗО (Fe)

351

ρ г см ⁻³	T K	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ ВТ см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+07	0,240E+02	0,1364E+05	0,1417E+11
0,316E-02	0,316E+07	0,239E+02	0,1545E+05	0,1605E+11
0,100E-01	0,316E+07	0,238E+02	0,1786E+05	0,1855E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,233E+02	0,2133E+05	0,2213E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,218E+02	0,2649E+05	0,2741E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,200E+02	0,3376E+05	0,3477E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,182E+02	0,4408E+05	0,4519E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,167E+02	0,5929E+05	0,6051E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,159E+02	0,8401E+05	0,8557E+11
0,316E+02	0,316E+07	0,141E+02	0,1236E+06	0,1252E+12
0,100E+03	0,316E+07	0,127E+02	0,1953E+06	0,1969E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,160E+02	0,4449E+06	0,4482E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,171E+02	0,1078E+07	0,1063E+13
0,100E-02	0,100E+08	0,259E+02	0,5615E+05	0,1853E+12
0,316E-02	0,100E+08	0,258E+02	0,6147E+05	0,2028E+12
0,100E-01	0,100E+08	0,254E+02	0,6858E+05	0,2261E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,248E+02	0,7789E+05	0,2565E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,243E+02	0,8962E+05	0,2949E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,241E+02	0,1045E+06	0,3439E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,240E+02	0,1253E+06	0,4120E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,240E+02	0,1559E+06	0,5126E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,238E+02	0,2044E+06	0,6717E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,229E+02	0,2839E+06	0,9313E+12
0,100E+03	0,100E+08	0,199E+02	0,4086E+06	0,1332E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,178E+02	0,6286E+06	0,2036E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,182E+02	0,1135E+07	0,3652E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,260E+02	0,2612E+06	0,2723E+13
0,316E-02	0,316E+08	0,260E+02	0,2796E+06	0,2915E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,260E+02	0,3012E+06	0,3140E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,260E+02	0,3268E+06	0,3407E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,260E+02	0,3580E+06	0,3733E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,260E+02	0,3969E+06	0,4138E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,260E+02	0,4470E+06	0,4660E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,260E+02	0,5139E+06	0,5359E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,259E+02	0,6090E+06	0,6348E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,257E+02	0,7499E+06	0,7813E+13
0,100E+03	0,316E+08	0,251E+02	0,9737E+06	0,1013E+14
0,316E+03	0,316E+08	0,243E+02	0,1346E+07	0,1398E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,233E+02	0,2017E+07	0,2086E+14

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ³ В ⁻¹
0,100E-02	0,100E+09	0,260E+02	0,1274E+07	0,4204E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,260E+02	0,1349E+07	0,4452E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,260E+02	0,1435E+07	0,4734E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,260E+02	0,1532E+07	0,5055E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,260E+02	0,1645E+07	0,5428E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,260E+02	0,1778E+07	0,5865E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,260E+02	0,1937E+07	0,6391E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,260E+02	0,2132E+07	0,7035E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,260E+02	0,2379E+07	0,7851E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,260E+02	0,2704E+07	0,8921E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,260E+02	0,3153E+07	0,1040E+15
0,316E+03	0,100E+09	0,259E+02	0,3820E+07	0,1260E+15
0,100E+04	0,100E+09	0,258E+02	0,4879E+07	0,1608E+15

10.3. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ меди (Cu) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,5391E+04	0,1533E+06
0,316E+01	0,100E+03	0,200E+01	0,9241E+05	0,2623E+07
0,100E+02	0,100E+03	0,300E+01	0,8534E+06	0,2421E+08
0,316E+02	0,100E+03	0,500E+01	0,9939E+07	0,2818E+09
0,100E+03	0,100E+03	0,100E+02	0,1718E+09	0,4870E+10
0,316E+03	0,100E+03	0,160E+02	0,1808E+10	0,5126E+11
0,100E+04	0,100E+03	0,190E+02	0,1009E+11	0,2862E+12
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,155E-24	0,6338E-21	0,2843E-19
0,100E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,1913E+04	0,1728E+06
0,316E+01	0,316E+03	0,200E+01	0,3004E+05	0,2701E+07
0,100E+02	0,316E+03	0,300E+01	0,2726E+06	0,2445E+08
0,316E+02	0,316E+03	0,500E+01	0,3154E+07	0,2827E+09
0,100E+03	0,316E+03	0,100E+02	0,5439E+08	0,4874E+10
0,316E+03	0,316E+03	0,160E+02	0,5723E+09	0,5128E+11
0,100E+04	0,316E+03	0,190E+02	0,3194E+10	0,2862E+12
0,100E-02	0,100E+04	0,160E-18	0,3678E-15	0,5221E-13
0,316E-02	0,100E+04	0,882E-19	0,2027E-15	0,2878E-13
0,100E-01	0,100E+04	0,502E-19	0,1154E-15	0,1638E-13
0,316E-01	0,100E+04	0,391E-19	0,8988E-16	0,1276E-13
0,100E+00	0,100E+04	0,258E-17	0,5931E-14	0,8419E-12
0,316E+00	0,100E+04	0,742E-08	0,1706E-04	0,2421E-02
0,100E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,8319E+03	0,2404E+06
0,316E+01	0,100E+04	0,200E+01	0,1031E+05	0,2952E+07
0,100E+02	0,100E+04	0,300E+01	0,8863E+05	0,2524E+08
0,316E+02	0,100E+04	0,500E+01	0,1005E+07	0,2855E+09
0,100E+03	0,100E+04	0,100E+02	0,1723E+08	0,4887E+10
0,316E+03	0,100E+04	0,160E+02	0,1810E+09	0,5132E+11
0,100E+04	0,100E+04	0,190E+02	0,1010E+10	0,2863E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ^{0,5} В ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,685E-05	0,8843E-02	0,3967E+01
0,316E-02	0,316E+04	0,397E-05	0,5129E-02	0,2301E+01
0,100E-01	0,316E+04	0,226E-05	0,2921E-02	0,1310E+01
0,316E-01	0,316E+04	0,139E-05	0,1797E-02	0,8061E+00
0,100E+00	0,316E+04	0,367E-05	0,4742E-02	0,2128E+01
0,316E+00	0,316E+04	0,388E-02	0,4022E+01	0,1990E+04
0,100E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,5501E+03	0,5017E+06
0,316E+01	0,316E+04	0,200E+01	0,4135E+04	0,3797E+07
0,100E+02	0,316E+04	0,300E+01	0,3061E+05	0,2777E+08
0,316E+02	0,316E+04	0,500E+01	0,3270E+06	0,2944E+09
0,100E+03	0,316E+04	0,100E+02	0,5490E+07	0,4927E+10
0,316E+03	0,316E+04	0,160E+02	0,5740E+08	0,5146E+11
0,100E+04	0,316E+04	0,190E+02	0,3198E+09	0,2866E+12
0,100E-02	0,100E+05	0,249E+00	0,4651E+02	0,6681E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,154E+00	0,4251E+02	0,6148E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,924E-01	0,3549E+02	0,5181E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,579E-01	0,2799E+02	0,4150E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,577E-01	0,2976E+02	0,4613E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,354E+00	0,1332E+03	0,2764E+06
0,100E+01	0,100E+05	0,100E+01	0,6262E+03	0,1677E+07
0,316E+01	0,100E+05	0,200E+01	0,2357E+04	0,6951E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,300E+01	0,1244E+05	0,3635E+08
0,316E+02	0,100E+05	0,500E+01	0,1123E+06	0,3231E+09
0,100E+03	0,100E+05	0,100E+02	0,1774E+07	0,5055E+10
0,316E+03	0,100E+05	0,160E+02	0,1827E+08	0,5191E+11
0,100E+04	0,100E+05	0,190E+02	0,1014E+09	0,2877E+12
0,100E-02	0,316E+05	0,182E+01	0,2083E+03	0,1385E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,161E+01	0,2554E+03	0,1611E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,134E+01	0,3254E+03	0,1881E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,108E+01	0,4276E+03	0,2219E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,900E+00	0,4703E+03	0,2469E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,917E+00	0,6255E+03	0,3709E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,115E+01	0,1132E+04	0,8336E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,200E+01	0,2310E+04	0,2096E+08
0,100E+02	0,316E+05	0,301E+01	0,7330E+04	0,6914E+08
0,316E+02	0,316E+05	0,500E+01	0,4518E+05	0,4195E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,100E+02	0,6009E+06	0,5463E+10
0,316E+03	0,316E+05	0,160E+02	0,5918E+07	0,5332E+11
0,100E+04	0,316E+05	0,190E+02	0,3241E+08	0,2911E+12

10.3. МЕДЬ (Cu)

355

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,384E+01	0,5778E+03	0,1547E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,358E+01	0,6904E+03	0,1820E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,324E+01	0,8476E+03	0,2185E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,286E+01	0,1068E+04	0,2675E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,250E+01	0,1380E+04	0,3362E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,219E+01	0,1842E+04	0,4415E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,206E+01	0,2564E+04	0,6324E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,228E+01	0,3906E+04	0,1054E+09
0,100E+02	0,100E+06	0,319E+01	0,7735E+04	0,2293E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,501E+01	0,2592E+05	0,7843E+09
0,100E+03	0,100E+06	0,100E+02	0,2312E+06	0,6811E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,160E+02	0,2008E+07	0,5786E+11
0,100E+04	0,100E+06	0,190E+02	0,1057E+08	0,3020E+12
0,100E-02	0,316E+06	0,965E+01	0,1414E+04	0,1380E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,877E+01	0,1723E+04	0,1664E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,778E+01	0,2144E+04	0,2044E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,678E+01	0,2715E+04	0,2545E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,580E+01	0,3506E+04	0,3220E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,489E+01	0,4625E+04	0,4153E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,411E+01	0,6274E+04	0,5521E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,365E+01	0,8813E+04	0,7749E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,383E+01	0,1337E+05	0,1223E+10
0,316E+02	0,316E+06	0,525E+01	0,2645E+05	0,2553E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,100E+02	0,1200E+06	0,1160E+11
0,316E+03	0,316E+06	0,160E+02	0,7783E+06	0,7275E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,190E+02	0,3683E+07	0,3370E+12
0,100E-03	0,100E+07	0,190E+02	0,3807E+04	0,1238E+10
0,316E-02	0,100E+07	0,189E+02	0,4447E+04	0,1445E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,183E+02	0,5385E+04	0,1747E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,165E+02	0,6797E+04	0,2192E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,148E+02	0,8731E+04	0,2796E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,128E+02	0,1146E+05	0,3636E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,109E+02	0,1537E+05	0,4818E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,921E+01	0,2116E+05	0,6557E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,741E+01	0,3017E+05	0,9219E+10
0,316E+02	0,100E+07	0,712E+01	0,4664E+05	0,1436E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,102E+02	0,1037E+06	0,3264E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,160E+02	0,4071E+06	0,1256E+12
0,100E+04	0,100E+07	0,190E+02	0,1524E+07	0,4552E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+07	0,269E+02	0,1232E+05	0,1286E+11
0,316E-02	0,316E+07	0,266E+02	0,1399E+05	0,1460E+11
0,100E-01	0,316E+07	0,257E+02	0,1638E+05	0,1707E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,240E+02	0,1982E+05	0,2060E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,224E+02	0,2441E+05	0,2528E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,206E+02	0,3078E+05	0,3175E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,195E+02	0,3959E+05	0,4074E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,190E+02	0,5301E+05	0,5448E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,180E+02	0,7493E+05	0,7682E+11
0,316E+02	0,316E+07	0,146E+02	0,1068E+06	0,1084E+12
0,100E+03	0,316E+07	0,129E+02	0,1647E+06	0,1662E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,163E+02	0,3522E+06	0,3555E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,190E+02	0,9131E+06	0,9013E+12
0,100E-02	0,100E+08	0,283E+02	0,5166E+05	0,1710E+12
0,316E-02	0,100E+08	0,277E+02	0,5723E+05	0,1893E+12
0,100E-01	0,100E+08	0,273E+02	0,6367E+05	0,2105E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,271E+02	0,7133E+05	0,2358E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,270E+02	0,8106E+05	0,2679E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,270E+02	0,9393E+05	0,3104E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,270E+02	0,1121E+06	0,3704E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,269E+02	0,1392E+06	0,4597E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,265E+02	0,1817E+06	0,5997E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,247E+02	0,2499E+06	0,8222E+12
0,100E+03	0,100E+08	0,214E+02	0,3573E+06	0,1168E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,195E+02	0,5478E+06	0,1780E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,196E+02	0,9624E+06	0,3103E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,290E+02	0,2362E+06	0,2473E+13
0,316E-02	0,316E+08	0,290E+02	0,2528E+06	0,2647E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,290E+02	0,2723E+06	0,2851E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,290E+02	0,2954E+06	0,3093E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,290E+02	0,3234E+06	0,3386E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,290E+02	0,3582E+06	0,3750E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,290E+02	0,4028E+06	0,4218E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,289E+02	0,4631E+06	0,4848E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,288E+02	0,5468E+06	0,5724E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,284E+02	0,6719E+06	0,7027E+13
0,100E+03	0,316E+08	0,276E+02	0,8678E+06	0,9063E+13
0,316E+03	0,316E+08	0,269E+02	0,1190E+07	0,1240E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,256E+02	0,1765E+07	0,1831E+14

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+09	0,290E+02	0,1150E+07	0,3812E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,290E+02	0,1218E+07	0,4037E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,290E+02	0,1295E+07	0,4293E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,290E+02	0,1383E+07	0,4584E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,290E+02	0,1485E+07	0,4921E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,290E+02	0,1604E+07	0,5317E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,290E+02	0,1747E+07	0,5790E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,290E+02	0,1922E+07	0,6369E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,290E+02	0,2143E+07	0,7100E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,290E+02	0,2431E+07	0,8055E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,290E+02	0,2828E+07	0,9368E+14
0,316E+03	0,100E+09	0,289E+02	0,3413E+07	0,1130E+15
0,100E+04	0,100E+09	0,288E+02	0,4338E+07	0,1435E+15

10.4. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ золота (Au) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,1222E+05	0,3476E+06
0,100E+02	0,100E+03	0,200E+01	0,2132E+06	0,6051E+07
0,316E+02	0,100E+03	0,300E+01	0,1970E+07	0,5589E+08
0,100E+03	0,100E+03	0,600E+01	0,3436E+08	0,9745E+09
0,316E+03	0,100E+03	0,110E+02	0,4890E+09	0,1387E+11
0,100E+04	0,100E+03	0,180E+02	0,5402E+10	0,1532E+12
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,4174E+04	0,3771E+06
0,100E+02	0,316E+03	0,200E+01	0,6880E+05	0,6185E+07
0,316E+02	0,316E+03	0,300E+01	0,6279E+06	0,5633E+08
0,100E+03	0,316E+03	0,600E+01	0,1090E+08	0,9767E+09
0,316E+03	0,316E+03	0,110E+02	0,1548E+09	0,1388E+11
0,100E+04	0,316E+03	0,180E+02	0,1710E+10	0,1532E+12
0,100E-02	0,100E+04	0,193E-21	0,4437E-18	0,6298E-16
0,316E-02	0,100E+04	0,117E-21	0,2689E-18	0,3818E-16
0,100E-01	0,100E+04	0,430E-22	0,9884E-19	0,1403E-16
0,316E-01	0,100E+04	0,261E-22	0,6000E-19	0,8517E-17
0,100E+00	0,100E+04	0,158E-22	0,3632E-19	0,5156E-17
0,316E+00	0,100E+04	0,710E-22	0,1632E-18	0,2317E-16
0,100E+01	0,100E+04	0,171E-14	0,3931E-11	0,5580E-09
0,316E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,1642E+04	0,4745E+06
0,100E+02	0,100E+04	0,200E+01	0,2310E+05	0,6613E+07
0,316E+02	0,100E+04	0,300E+01	0,2028E+06	0,5773E+08
0,100E+03	0,100E+04	0,600E+01	0,3464E+07	0,9835E+09
0,316E+03	0,100E+04	0,110E+02	0,4902E+08	0,1391E+11
0,100E+04	0,100E+04	0,180E+02	0,5407E+09	0,1533E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,107E-05	0,1383E-02	0,6205E+00
0,316E-02	0,316E+04	0,572E-06	0,7395E-03	0,3318E+00
0,100E-01	0,316E+04	0,347E-06	0,4487E-03	0,2013E+00
0,316E-01	0,316E+04	0,186E-06	0,2405E-03	0,1079E+00
0,100E+00	0,316E+04	0,113E-06	0,1461E-03	0,6555E-01
0,316E+00	0,316E+04	0,144E-06	0,1862E-03	0,8353E-01
0,100E+01	0,316E+04	0,189E-04	0,2436E-01	0,1096E+02
0,316E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,8954E+03	0,8169E+06
0,100E+02	0,316E+04	0,200E+01	0,8710E+04	0,7995E+07
0,316E+02	0,316E+04	0,300E+01	0,6858E+05	0,6219E+08
0,100E+03	0,316E+04	0,600E+01	0,1117E+07	0,1005E+10
0,316E+03	0,316E+04	0,110E+02	0,1560E+08	0,1400E+11
0,100E+04	0,316E+04	0,180E+02	0,1714E+09	0,1537E+12
0,100E-02	0,100E+05	0,212E+00	0,4019E+02	0,5734E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,126E+00	0,3577E+02	0,5117E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,759E-01	0,2960E+02	0,4252E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,421E-01	0,2119E+02	0,3061E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,244E-01	0,1434E+02	0,2088E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,191E-01	0,1194E+02	0,1773E+05
0,100E+01	0,100E+05	0,716E-01	0,3874E+02	0,6653E+05
0,316E+01	0,100E+05	0,100E+01	0,8128E+03	0,2180E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,200E+01	0,4301E+04	0,1268E+08
0,316E+02	0,100E+05	0,300E+01	0,2625E+05	0,7668E+08
0,100E+03	0,100E+05	0,600E+01	0,3736E+06	0,1073E+10
0,316E+03	0,100E+05	0,110E+02	0,5018E+07	0,1430E+11
0,100E+04	0,100E+05	0,180E+02	0,5450E+08	0,1548E+12
0,100E-02	0,316E+05	0,194E+01	0,1819E+03	0,1241E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,183E+01	0,2162E+03	0,1441E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,162E+01	0,2666E+03	0,1687E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,134E+01	0,3406E+03	0,1969E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,104E+01	0,4517E+03	0,2281E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,809E+00	0,4180E+03	0,2178E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,789E+00	0,4932E+03	0,2879E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,110E+01	0,1286E+04	0,9342E+07
0,100E+02	0,316E+05	0,200E+01	0,3372E+04	0,3061E+08
0,316E+02	0,316E+05	0,300E+01	0,1340E+05	0,1263E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,601E+01	0,1399E+06	0,1296E+10
0,316E+03	0,316E+05	0,110E+02	0,1677E+07	0,1523E+11
0,100E+04	0,316E+05	0,180E+02	0,1757E+08	0,1582E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,499E+01	0,4711E+03	0,1329E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,443E+01	0,5784E+03	0,1596E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,387E+01	0,7206E+03	0,1934E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,337E+01	0,9077E+03	0,2364E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,294E+01	0,1161E+04	0,2931E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,255E+01	0,1518E+04	0,3722E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,222E+01	0,2053E+04	0,4946E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,205E+01	0,2935E+04	0,7236E+08
0,100E+02	0,100E+06	0,224E+01	0,4808E+04	0,1294E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,314E+01	0,1148E+05	0,3399E+09
0,100E+03	0,100E+06	0,606E+01	0,6783E+05	0,2054E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,110E+02	0,6201E+06	0,1824E+11
0,100E+04	0,100E+06	0,180E+02	0,5880E+07	0,1693E+12
0,100E-02	0,316E+06	0,125E+02	0,1204E+04	0,1202E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,116E+02	0,1487E+04	0,1476E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,109E+02	0,1870E+04	0,1846E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,102E+02	0,2409E+04	0,2365E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,915E+01	0,3169E+04	0,3079E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,782E+01	0,4206E+04	0,4023E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,638E+01	0,5622E+04	0,5262E+09
0,316E+02	0,316E+06	0,493E+01	0,7591E+04	0,6902E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,398E+01	0,1078E+05	0,9641E+09
0,316E+02	0,316E+06	0,415E+01	0,1803E+05	0,1670E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,639E+01	0,5233E+05	0,5104E+10
0,316E+03	0,316E+06	0,110E+02	0,2907E+06	0,2807E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,180E+02	0,2193E+07	0,2045E+12
0,100E-02	0,100E+07	0,277E+02	0,3204E+04	0,1060E+10
0,316E-02	0,100E+07	0,261E+02	0,4009E+04	0,1323E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,244E+02	0,5135E+04	0,1690E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,228E+02	0,6735E+04	0,2210E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,213E+02	0,9079E+04	0,2969E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,184E+02	0,1214E+05	0,3939E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,166E+02	0,1690E+05	0,5454E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,139E+02	0,2308E+05	0,7372E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,111E+02	0,3140E+05	0,9889E+10
0,316E+02	0,100E+07	0,905E+01	0,4487E+05	0,1397E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,857E+01	0,7584E+05	0,2369E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,113E+02	0,2079E+06	0,6557E+11
0,100E+04	0,100E+07	0,180E+02	0,1040E+07	0,3203E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ⁻¹
0,100E-02	0,316E+07	0,509E+02	0,8894E+04	0,9466E+10
0,316E-02	0,316E+07	0,501E+02	0,1103E+05	0,1174E+11
0,100E-01	0,316E+07	0,474E+02	0,1414E+05	0,1502E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,446E+02	0,1857E+05	0,1970E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,417E+02	0,2499E+05	0,2647E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,382E+02	0,3418E+05	0,3611E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,342E+02	0,4719E+05	0,4968E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,316E+02	0,6827E+05	0,7167E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,277E+02	0,9775E+05	0,1021E+12
0,316E+02	0,316E+07	0,233E+02	0,1389E+06	0,1441E+12
0,100E+03	0,316E+07	0,181E+02	0,1901E+06	0,1949E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,155E+02	0,2991E+06	0,3042E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,184E+02	0,7458E+06	0,7535E+12
0,100E-02	0,100E+08	0,690E+02	0,2761E+05	0,9351E+11
0,316E-02	0,100E+08	0,690E+02	0,3241E+05	0,1098E+12
0,100E-01	0,100E+08	0,689E+02	0,3937E+05	0,1334E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,684E+02	0,4971E+05	0,1683E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,658E+02	0,6498E+05	0,2199E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,628E+02	0,8751E+05	0,2959E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,586E+02	0,1203E+06	0,4062E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,541E+02	0,1688E+06	0,5689E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,516E+02	0,2505E+06	0,8428E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,492E+02	0,3882E+06	0,1303E+13
0,100E+03	0,100E+08	0,416E+02	0,5556E+06	0,1855E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,327E+02	0,7625E+06	0,2523E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,268E+02	0,1147E+07	0,3755E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,770E+02	0,1040E+06	0,1115E+13
0,316E-02	0,316E+08	0,770E+02	0,1154E+06	0,1237E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,770E+02	0,1305E+06	0,1399E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,770E+02	0,1513E+06	0,1623E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,769E+02	0,1811E+06	0,1941E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,766E+02	0,2248E+06	0,2410E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,749E+02	0,2902E+06	0,3110E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,726E+02	0,3883E+06	0,4159E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,702E+02	0,5397E+06	0,5776E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,692E+02	0,7920E+06	0,8469E+13
0,100E+03	0,316E+08	0,685E+02	0,1232E+07	0,1315E+14
0,316E+03	0,316E+08	0,634E+02	0,1900E+07	0,2022E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,537E+02	0,2804E+07	0,2963E+14

ρ $\Gamma \text{ см}^{-3}$	T К	Z	σ $\text{Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$	χ $\text{Вт см}^{-1} \text{ КВ}^{-1}$
0,100E-02	0,100E+09	0,790E+02	0,4622E+06	0,1569E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,790E+02	0,4962E+06	0,1684E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,790E+02	0,5378E+06	0,1825E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,789E+02	0,5902E+06	0,2003E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,786E+02	0,6589E+06	0,2236E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,781E+02	0,7510E+06	0,2549E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,775E+02	0,8776E+06	0,2978E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,772E+02	0,1055E+07	0,3580E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,771E+02	0,1317E+07	0,4468E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,770E+02	0,1718E+07	0,5829E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,769E+02	0,2361E+07	0,8005E+14
0,316E+03	0,100E+09	0,767E+02	0,3432E+07	0,1162E+15
0,100E+04	0,100E+09	0,752E+02	0,5257E+07	0,1776E+15

10.5. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ свинца (Pb) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,6703E+04	0,1906E+06
0,100E+02	0,100E+03	0,200E+01	0,1158E+06	0,3287E+07
0,316E+02	0,100E+03	0,400E+01	0,2027E+07	0,5751E+08
0,100E+03	0,100E+03	0,600E+01	0,1863E+08	0,5283E+09
0,316E+03	0,100E+03	0,110E+02	0,2651E+09	0,7517E+10
0,100E+04	0,100E+03	0,180E+02	0,2927E+10	0,8300E+11
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,316E+03	0,170E-29	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,2346E+04	0,2120E+06
0,100E+02	0,316E+03	0,200E+01	0,3755E+05	0,3376E+07
0,316E+02	0,316E+03	0,400E+01	0,6456E+06	0,5791E+08
0,100E+03	0,316E+03	0,600E+01	0,5908E+07	0,5296E+09
0,316E+03	0,316E+03	0,110E+02	0,8394E+08	0,7522E+10
0,100E+04	0,316E+03	0,180E+02	0,9265E+09	0,8302E+11
0,100E-02	0,100E+04	0,154E-17	0,3540E-14	0,5025E-12
0,316E-02	0,100E+04	0,863E-18	0,1984E-14	0,2816E-12
0,100E-01	0,100E+04	0,486E-18	0,1117E-14	0,1586E-12
0,316E-01	0,100E+04	0,274E-18	0,6298E-15	0,8941E-13
0,100E+00	0,100E+04	0,183E-18	0,4207E-15	0,5972E-13
0,316E+00	0,100E+04	0,295E-17	0,6781E-14	0,9626E-12
0,100E+01	0,100E+04	0,188E-09	0,4322E-06	0,6135E-04
0,316E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,9854E+03	0,2848E+06
0,100E+02	0,100E+04	0,200E+01	0,1279E+05	0,3663E+07
0,316E+02	0,100E+04	0,400E+01	0,2080E+06	0,5920E+08
0,100E+03	0,100E+04	0,600E+01	0,1880E+07	0,5338E+09
0,316E+03	0,100E+04	0,110E+02	0,2658E+08	0,7540E+10
0,100E+04	0,100E+04	0,180E+02	0,2930E+09	0,8308E+11

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ ВТ см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,214E-04	0,2753E-01	0,1235E+02
0,316E-02	0,316E+04	0,121E-04	0,1560E-01	0,7000E+01
0,100E-01	0,316E+04	0,684E-05	0,8831E-02	0,3962E+01
0,316E-01	0,316E+04	0,387E-05	0,5000E-02	0,2243E+01
0,100E+00	0,316E+04	0,231E-05	0,2986E-02	0,1340E+01
0,316E+00	0,316E+04	0,381E-05	0,4923E-02	0,2209E+01
0,100E+01	0,316E+04	0,105E-02	0,1247E+01	0,5842E+03
0,316E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,6129E+03	0,5587E+06
0,100E+02	0,316E+04	0,200E+01	0,5023E+04	0,4614E+07
0,316E+02	0,316E+04	0,400E+01	0,6986E+05	0,6330E+08
0,100E+03	0,316E+04	0,600E+01	0,6077E+06	0,5470E+09
0,316E+03	0,316E+04	0,110E+02	0,8464E+07	0,7595E+10
0,100E+04	0,316E+04	0,180E+02	0,9290E+08	0,8329E+11
0,100E-02	0,100E+05	0,451E+00	0,4956E+02	0,7092E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,294E+00	0,4930E+02	0,7090E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,184E+00	0,4619E+02	0,6692E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,113E+00	0,4003E+02	0,5863E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,690E-01	0,3179E+02	0,4733E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,598E-01	0,3068E+02	0,4756E+05
0,100E+01	0,100E+05	0,258E+00	0,1050E+03	0,2079E+06
0,316E+01	0,100E+05	0,100E+01	0,6552E+03	0,1750E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,200E+01	0,2732E+04	0,8056E+07
0,316E+02	0,100E+05	0,400E+01	0,2627E+05	0,7669E+08
0,100E+03	0,100E+05	0,600E+01	0,2050E+06	0,5892E+09
0,316E+03	0,100E+05	0,110E+02	0,2728E+07	0,7772E+10
0,100E+04	0,100E+05	0,180E+02	0,2955E+08	0,8393E+11
0,100E-02	0,316E+05	0,191E+01	0,1782E+03	0,1207E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,171E+01	0,2147E+03	0,1386E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,146E+01	0,2667E+03	0,1595E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,121E+01	0,3393E+03	0,1835E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,101E+01	0,4391E+03	0,2161E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,869E+00	0,4476E+03	0,2336E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,879E+00	0,5777E+03	0,3394E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,108E+01	0,1150E+04	0,8240E+07
0,100E+02	0,316E+05	0,200E+01	0,2504E+04	0,2268E+08
0,316E+02	0,316E+05	0,400E+01	0,1298E+05	0,1230E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,600E+01	0,7841E+05	0,7272E+09
0,316E+03	0,316E+05	0,110E+02	0,9171E+06	0,8335E+10
0,100E+04	0,316E+05	0,180E+02	0,9545E+07	0,8597E+11

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,511E+01	0,4432E+03	0,1256E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,469E+01	0,5336E+03	0,1489E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,433E+01	0,6496E+03	0,1786E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,407E+01	0,8005E+03	0,2178E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,376E+01	0,1016E+04	0,2729E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,314E+01	0,1344E+04	0,3493E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,230E+01	0,1859E+04	0,4524E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,191E+01	0,2636E+04	0,6334E+08
0,100E+02	0,100E+06	0,248E+01	0,4134E+04	0,1133E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,402E+01	0,1029E+05	0,3105E+09
0,100E+03	0,100E+06	0,602E+01	0,4016E+05	0,1217E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,110E+02	0,3452E+06	0,1016E+11
0,100E+04	0,100E+06	0,180E+02	0,3211E+07	0,9248E+11
0,100E-02	0,316E+06	0,133E+02	0,1075E+04	0,1079E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,125E+02	0,1305E+04	0,1304E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,114E+02	0,1625E+04	0,1611E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,101E+02	0,2066E+04	0,2026E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,887E+01	0,2665E+04	0,2581E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,759E+01	0,3498E+04	0,3334E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,633E+01	0,4681E+04	0,4375E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,522E+01	0,6426E+04	0,5892E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,454E+01	0,9247E+04	0,8441E+09
0,316E+02	0,316E+06	0,462E+01	0,1490E+05	0,1397E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,629E+01	0,3444E+05	0,3357E+10
0,316E+03	0,316E+06	0,111E+02	0,1720E+06	0,1663E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,180E+02	0,1216E+07	0,1135E+12
0,100E-02	0,100E+07	0,277E+02	0,2834E+04	0,9376E+09
0,316E-02	0,100E+07	0,262E+02	0,3450E+04	0,1139E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,247E+02	0,4289E+04	0,1412E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,233E+02	0,5458E+04	0,1792E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,207E+02	0,7100E+04	0,2319E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,189E+02	0,9435E+04	0,3067E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,164E+02	0,1269E+05	0,4092E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,139E+02	0,1730E+05	0,5526E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,117E+02	0,2420E+05	0,7652E+10
0,316E+02	0,100E+07	0,914E+01	0,3405E+05	0,1061E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,844E+01	0,5450E+05	0,1700E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,115E+02	0,1358E+06	0,4287E+11
0,100E+04	0,100E+07	0,181E+02	0,6060E+06	0,1868E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+07	0,529E+02	0,7704E+04	0,8206E+10
0,316E-02	0,316E+07	0,503E+02	0,9339E+04	0,9937E+10
0,100E-01	0,316E+07	0,477E+02	0,1157E+05	0,1230E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,449E+02	0,1469E+05	0,1559E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,418E+02	0,1910E+05	0,2023E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,379E+02	0,2529E+05	0,2671E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,353E+02	0,3458E+05	0,3644E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,322E+02	0,4835E+05	0,5079E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,279E+02	0,6765E+05	0,7068E+11
0,316E+02	0,316E+07	0,238E+02	0,9651E+05	0,1002E+12
0,100E+03	0,316E+07	0,182E+02	0,1324E+06	0,1357E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,151E+02	0,2011E+06	0,2043E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,188E+02	0,4798E+06	0,4852E+12
0,100E-02	0,100E+08	0,720E+02	0,2479E+05	0,8402E+11
0,316E-02	0,100E+08	0,719E+02	0,2838E+05	0,9621E+11
0,100E-01	0,100E+08	0,716E+02	0,3341E+05	0,1132E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,695E+02	0,4080E+05	0,1382E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,670E+02	0,5133E+05	0,1738E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,632E+02	0,6646E+05	0,2247E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,592E+02	0,8837E+05	0,2985E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,554E+02	0,1210E+06	0,4079E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,540E+02	0,1756E+06	0,5916E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,500E+02	0,2586E+06	0,8686E+12
0,100E+03	0,100E+08	0,422E+02	0,3672E+06	0,1227E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,336E+02	0,5139E+06	0,1702E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,272E+02	0,7643E+06	0,2504E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,800E+02	0,9733E+05	0,1044E+13
0,316E-02	0,316E+08	0,800E+02	0,1066E+06	0,1144E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,800E+02	0,1185E+06	0,1271E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,799E+02	0,1343E+06	0,1441E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,798E+02	0,1560E+06	0,1673E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,788E+02	0,1872E+06	0,2007E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,766E+02	0,2326E+06	0,2494E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,744E+02	0,2989E+06	0,3203E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,726E+02	0,3997E+06	0,4280E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,720E+02	0,5636E+06	0,6030E+13
0,100E+03	0,316E+08	0,709E+02	0,8401E+06	0,8976E+13
0,316E+03	0,316E+08	0,645E+02	0,1249E+07	0,1330E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,556E+02	0,1860E+07	0,1967E+14

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КэВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+09	0,820E+02	0,4414E+06	0,1499E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,820E+02	0,4717E+06	0,1602E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,819E+02	0,5082E+06	0,1726E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,817E+02	0,5528E+06	0,1877E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,813E+02	0,6095E+06	0,2070E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,806E+02	0,6834E+06	0,2320E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,802E+02	0,7789E+06	0,2644E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,801E+02	0,9076E+06	0,3081E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,800E+02	0,1092E+07	0,3706E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,800E+02	0,1365E+07	0,4633E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,799E+02	0,1792E+07	0,6079E+14
0,316E+03	0,100E+09	0,796E+02	0,2488E+07	0,8430E+14
0,100E+04	0,100E+09	0,776E+02	0,3650E+07	0,1234E+15

10.6. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ висмута (Bi) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,6200E+04	0,1763E+06
0,100E+02	0,100E+03	0,200E+01	0,1069E+06	0,3036E+07
0,316E+02	0,100E+03	0,300E+01	0,9863E+06	0,2798E+08
0,100E+03	0,100E+03	0,600E+01	0,1720E+08	0,4877E+09
0,316E+03	0,100E+03	0,110E+02	0,2447E+09	0,6939E+10
0,100E+04	0,100E+03	0,180E+02	0,2702E+10	0,7661E+11
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,316E+03	0,565E-23	0,2310E-19	0,1036E-17
0,316E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,2179E+04	0,1969E+06
0,100E+02	0,316E+03	0,200E+01	0,3471E+05	0,3120E+07
0,316E+02	0,316E+03	0,300E+01	0,3148E+06	0,2825E+08
0,100E+03	0,316E+03	0,600E+01	0,5454E+07	0,4889E+09
0,316E+03	0,316E+03	0,110E+02	0,7749E+08	0,6944E+10
0,100E+04	0,316E+03	0,180E+02	0,8552E+09	0,7663E+11
0,100E-02	0,100E+04	0,547E-16	0,1257E-12	0,1785E-10
0,316E-02	0,100E+04	0,308E-16	0,7080E-13	0,1005E-10
0,100E-01	0,100E+04	0,173E-16	0,3977E-13	0,5645E-11
0,316E-01	0,100E+04	0,980E-17	0,2253E-13	0,3198E-11
0,100E+00	0,100E+04	0,695E-17	0,1598E-13	0,2268E-11
0,316E+00	0,100E+04	0,198E-15	0,4551E-12	0,6461E-10
0,100E+01	0,100E+04	0,222E-07	0,5103E-04	0,7245E-02
0,316E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,9250E+03	0,2673E+06
0,100E+02	0,100E+04	0,200E+01	0,1185E+05	0,3394E+07
0,316E+02	0,100E+04	0,300E+01	0,1022E+06	0,2911E+08
0,100E+03	0,100E+04	0,600E+01	0,1736E+07	0,4929E+09
0,316E+03	0,100E+04	0,110E+02	0,2454E+08	0,6961E+10
0,100E+04	0,100E+04	0,180E+02	0,2704E+09	0,7669E+11

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ юВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,664E-04	0,8460E-01	0,3795E+02
0,316E-02	0,316E+04	0,379E-04	0,4861E-01	0,2181E+02
0,100E-01	0,316E+04	0,214E-04	0,2755E-01	0,1236E+02
0,316E-01	0,316E+04	0,121E-04	0,1561E-01	0,7004E+01
0,100E+00	0,316E+04	0,739E-05	0,9542E-02	0,4282E+01
0,316E+00	0,316E+04	0,149E-04	0,1922E-01	0,8631E+01
0,100E+01	0,316E+04	0,550E-02	0,5401E+01	0,2723E+04
0,316E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,5864E+03	0,5345E+06
0,100E+02	0,316E+04	0,200E+01	0,4686E+04	0,4304E+07
0,316E+02	0,316E+04	0,300E+01	0,3515E+05	0,3189E+08
0,100E+03	0,316E+04	0,600E+01	0,5614E+06	0,5053E+09
0,316E+03	0,316E+04	0,110E+02	0,7815E+07	0,7013E+10
0,100E+04	0,316E+04	0,180E+02	0,8576E+08	0,7688E+11
0,100E-02	0,100E+05	0,573E+00	0,5244E+02	0,7516E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,395E+00	0,5402E+02	0,7791E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,256E+00	0,5292E+02	0,7704E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,161E+00	0,4844E+02	0,7150E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,101E+00	0,4106E+02	0,6189E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,939E-01	0,4299E+02	0,6839E+05
0,100E+01	0,100E+05	0,395E+00	0,1466E+03	0,3070E+06
0,316E+01	0,100E+05	0,100E+01	0,6398E+03	0,1707E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,200E+01	0,2587E+04	0,7628E+07
0,316E+02	0,100E+05	0,301E+01	0,1418E+05	0,4146E+08
0,100E+03	0,100E+05	0,600E+01	0,1897E+06	0,5451E+09
0,316E+03	0,100E+05	0,110E+02	0,2520E+07	0,7179E+10
0,100E+04	0,100E+05	0,180E+02	0,2728E+08	0,7749E+11
0,100E-02	0,316E+05	0,197E+01	0,1752E+03	0,1202E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,178E+01	0,2104E+03	0,1384E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,153E+01	0,2608E+03	0,1601E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,127E+01	0,3319E+03	0,1853E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,106E+01	0,4299E+03	0,2196E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,913E+00	0,4801E+03	0,2514E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,913E+00	0,6197E+03	0,3653E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,108E+01	0,1136E+04	0,8132E+07
0,100E+02	0,316E+05	0,201E+01	0,2429E+04	0,2202E+08
0,316E+02	0,316E+05	0,308E+01	0,8309E+04	0,7843E+08
0,100E+03	0,316E+05	0,600E+01	0,7285E+05	0,6757E+09
0,316E+03	0,316E+05	0,110E+02	0,8479E+06	0,7707E+10
0,100E+04	0,316E+05	0,180E+02	0,8814E+07	0,7940E+11

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КЭВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,533E+01	0,4322E+03	0,1234E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,508E+01	0,5133E+03	0,1454E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,486E+01	0,6203E+03	0,1744E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,440E+01	0,7774E+03	0,2149E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,353E+01	0,1017E+04	0,2692E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,269E+01	0,1366E+04	0,3401E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,213E+01	0,1867E+04	0,4426E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,193E+01	0,2604E+04	0,6276E+08
0,100E+02	0,100E+06	0,229E+01	0,3986E+04	0,1074E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,351E+01	0,8760E+04	0,2616E+09
0,100E+03	0,100E+06	0,603E+01	0,3778E+05	0,1145E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,110E+02	0,3201E+06	0,9424E+10
0,100E+04	0,100E+06	0,180E+02	0,2968E+07	0,8549E+11
0,100E-02	0,316E+06	0,136E+02	0,1055E+04	0,1060E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,125E+02	0,1290E+04	0,1288E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,113E+02	0,1606E+04	0,1591E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,101E+02	0,2033E+04	0,1994E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,883E+01	0,2621E+04	0,2537E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,759E+01	0,3434E+04	0,3273E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,645E+01	0,4594E+04	0,4305E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,553E+01	0,6328E+04	0,5852E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,488E+01	0,9160E+04	0,8454E+09
0,316E+02	0,316E+06	0,497E+01	0,1492E+05	0,1411E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,630E+01	0,3292E+05	0,3209E+10
0,316E+03	0,316E+06	0,111E+02	0,1607E+06	0,1554E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,180E+02	0,1127E+07	0,1052E+12
0,100E-02	0,100E+09	0,830E+02	0,4362E+06	0,1482E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,830E+02	0,4660E+06	0,1583E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,829E+02	0,5018E+06	0,1704E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,826E+02	0,5460E+06	0,1854E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,821E+02	0,6019E+06	0,2044E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,815E+02	0,6733E+06	0,2287E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,812E+02	0,7654E+06	0,2599E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,811E+02	0,8898E+06	0,3021E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,810E+02	0,1067E+07	0,3623E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,810E+02	0,1330E+07	0,4514E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,809E+02	0,1738E+07	0,5898E+14
0,316E+03	0,100E+09	0,806E+02	0,2403E+07	0,8145E+14
0,100E+04	0,100E+09	0,783E+02	0,3507E+07	0,1186E+15

10.7. Зависимость среднего заряда тяжелых частиц Z , электропроводности σ и теплопроводности χ урана (U) от плотности ρ и температуры T

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,100E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+01	0,100E+03	0,100E+01	0,5383E+04	0,1531E+06
0,100E+02	0,100E+03	0,200E+01	0,9273E+05	0,2632E+07
0,316E+02	0,100E+03	0,400E+01	0,1624E+07	0,4606E+08
0,100E+03	0,100E+03	0,600E+01	0,1490E+08	0,4226E+09
0,316E+03	0,100E+03	0,120E+02	0,2569E+09	0,7284E+10
0,100E+04	0,100E+03	0,180E+02	0,2339E+10	0,6632E+11
0,100E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-02	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E-01	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,316E+00	0,316E+03	0,000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
0,100E+01	0,316E+03	0,739E-21	0,3022E-17	0,1356E-15
0,316E+01	0,316E+03	0,100E+01	0,1903E+04	0,1721E+06
0,100E+02	0,316E+03	0,200E+01	0,3014E+05	0,2711E+07
0,316E+02	0,316E+03	0,400E+01	0,5173E+06	0,4642E+08
0,100E+03	0,316E+03	0,600E+01	0,4727E+07	0,4237E+09
0,316E+03	0,316E+03	0,120E+02	0,8134E+08	0,7290E+10
0,100E+04	0,316E+03	0,180E+02	0,7403E+09	0,6633E+11
0,100E-02	0,100E+04	0,137E-14	0,3149E-11	0,4471E-09
0,316E-02	0,100E+04	0,773E-15	0,1777E-11	0,2522E-09
0,100E-01	0,100E+04	0,433E-15	0,9953E-12	0,1413E-09
0,316E-01	0,100E+04	0,244E-15	0,5609E-12	0,7962E-10
0,100E+00	0,100E+04	0,172E-15	0,3954E-12	0,5613E-10
0,316E+00	0,100E+04	0,367E-14	0,8436E-11	0,1198E-08
0,100E+01	0,100E+04	0,883E-07	0,2029E-03	0,2882E-01
0,316E+01	0,100E+04	0,100E+01	0,8197E+03	0,2371E+06
0,100E+02	0,100E+04	0,200E+01	0,1034E+05	0,2964E+07
0,316E+02	0,100E+04	0,400E+01	0,1670E+06	0,4755E+08
0,100E+03	0,100E+04	0,600E+01	0,1505E+07	0,4274E+09
0,316E+03	0,100E+04	0,120E+02	0,2576E+08	0,7307E+10
0,100E+04	0,100E+04	0,180E+02	0,2341E+09	0,6639E+11

ρ Г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ К ³ В ⁻¹
0,100E-02	0,316E+04	0,155E-03	0,1940E+00	0,8705E+02
0,316E-02	0,316E+04	0,885E-04	0,1124E+00	0,5044E+02
0,100E-01	0,316E+04	0,500E-04	0,6403E-01	0,2873E+02
0,316E-01	0,316E+04	0,284E-04	0,3653E-01	0,1639E+02
0,100E+00	0,316E+04	0,173E-04	0,2230E-01	0,1001E+02
0,316E+00	0,316E+04	0,321E-04	0,4130E-01	0,1856E+02
0,100E+01	0,316E+04	0,774E-02	0,7069E+01	0,3618E+04
0,316E+01	0,316E+04	0,100E+01	0,5327E+03	0,4845E+06
0,100E+02	0,316E+04	0,200E+01	0,4141E+04	0,3809E+07
0,316E+02	0,316E+04	0,400E+01	0,5641E+05	0,5116E+08
0,100E+03	0,316E+04	0,600E+01	0,4875E+06	0,4390E+09
0,316E+03	0,316E+04	0,120E+02	0,8203E+07	0,7362E+10
0,100E+04	0,316E+04	0,180E+02	0,7425E+08	0,6657E+11
0,100E-02	0,100E+05	0,608E+00	0,5244E+02	0,7512E+05
0,316E-02	0,100E+05	0,424E+00	0,5439E+02	0,7839E+05
0,100E-01	0,100E+05	0,278E+00	0,5388E+02	0,7838E+05
0,316E-01	0,100E+05	0,175E+00	0,4989E+02	0,7357E+05
0,100E+00	0,100E+05	0,110E+00	0,4291E+02	0,6458E+05
0,316E+00	0,100E+05	0,989E-01	0,4417E+02	0,6993E+05
0,100E+01	0,100E+05	0,361E+00	0,1328E+03	0,2700E+06
0,316E+01	0,100E+05	0,102E+01	0,6004E+03	0,1592E+07
0,100E+02	0,100E+05	0,202E+01	0,2371E+04	0,6994E+07
0,316E+02	0,100E+05	0,400E+01	0,2154E+05	0,6299E+08
0,100E+03	0,100E+05	0,600E+01	0,1655E+06	0,4761E+09
0,316E+03	0,100E+05	0,120E+02	0,2645E+07	0,7536E+10
0,100E+04	0,100E+05	0,180E+02	0,2363E+08	0,6713E+11
0,100E-02	0,316E+05	0,262E+01	0,1523E+03	0,1162E+07
0,316E-02	0,316E+05	0,235E+01	0,1853E+03	0,1365E+07
0,100E-01	0,316E+05	0,210E+01	0,2286E+03	0,1622E+07
0,316E-01	0,316E+05	0,186E+01	0,2875E+03	0,1961E+07
0,100E+00	0,316E+05	0,157E+01	0,3747E+03	0,2420E+07
0,316E+00	0,316E+05	0,123E+01	0,5117E+03	0,3057E+07
0,100E+01	0,316E+05	0,113E+01	0,7136E+03	0,4488E+07
0,316E+01	0,316E+05	0,153E+01	0,1110E+04	0,8812E+07
0,100E+02	0,316E+05	0,220E+01	0,2401E+04	0,2189E+08
0,316E+02	0,316E+05	0,400E+01	0,1098E+05	0,1042E+09
0,100E+03	0,316E+05	0,602E+01	0,6473E+05	0,6016E+09
0,316E+03	0,316E+05	0,120E+02	0,8897E+06	0,8090E+10
0,100E+04	0,316E+05	0,180E+02	0,7648E+07	0,6892E+11

ρ Г CM ⁻³	T K	Z	σ OM ⁻¹ CM ⁻¹	χ BT CM ⁻¹ KB ⁻¹
0,100E-02	0,100E+06	0,581E+01	0,4092E+03	0,1185E+08
0,316E-02	0,100E+06	0,532E+01	0,4953E+03	0,1414E+08
0,100E-01	0,100E+06	0,491E+01	0,6060E+03	0,1707E+08
0,316E-01	0,100E+06	0,443E+01	0,7586E+03	0,2099E+08
0,100E+00	0,100E+06	0,380E+01	0,9772E+03	0,2629E+08
0,316E+00	0,100E+06	0,320E+01	0,1287E+04	0,3355E+08
0,100E+01	0,100E+06	0,272E+01	0,1743E+04	0,4443E+08
0,316E+01	0,100E+06	0,248E+01	0,2469E+04	0,6373E+08
0,100E+02	0,100E+06	0,267E+01	0,3900E+04	0,1078E+09
0,316E+02	0,100E+06	0,414E+01	0,9362E+04	0,2825E+09
0,100E+03	0,100E+06	0,609E+01	0,3463E+05	0,1052E+10
0,316E+03	0,100E+06	0,120E+02	0,3354E+06	0,9885E+10
0,100E+04	0,100E+06	0,180E+02	0,2587E+07	0,7462E+11
0,100E-02	0,316E+06	0,142E+02	0,1018E+04	0,1027E+09
0,316E-02	0,316E+06	0,138E+02	0,1225E+04	0,1233E+09
0,100E-01	0,316E+06	0,126E+02	0,1532E+04	0,1531E+09
0,316E-01	0,316E+06	0,111E+02	0,1955E+04	0,1934E+09
0,100E+00	0,316E+06	0,102E+02	0,2527E+04	0,2482E+09
0,316E+00	0,316E+06	0,901E+01	0,3340E+04	0,3245E+09
0,100E+01	0,316E+06	0,735E+01	0,4476E+04	0,4264E+09
0,316E+01	0,316E+06	0,563E+01	0,6100E+04	0,5650E+09
0,100E+02	0,316E+06	0,461E+01	0,8681E+04	0,7923E+09
0,316E+02	0,316E+06	0,488E+01	0,1397E+05	0,1315E+10
0,100E+03	0,316E+06	0,652E+01	0,3148E+05	0,3074E+10
0,316E+03	0,316E+06	0,120E+02	0,1647E+06	0,1596E+11
0,100E+04	0,316E+06	0,180E+02	0,9942E+06	0,9308E+11
0,100E-02	0,100E+07	0,288E+02	0,2708E+04	0,8972E+09
0,316E-02	0,100E+07	0,275E+02	0,3282E+04	0,1085E+10
0,100E-01	0,100E+07	0,257E+02	0,4083E+04	0,1347E+10
0,316E-01	0,100E+07	0,239E+02	0,5188E+04	0,1706E+10
0,100E+00	0,100E+07	0,224E+02	0,6754E+04	0,2214E+10
0,316E+00	0,100E+07	0,201E+02	0,8967E+04	0,2924E+10
0,100E+01	0,100E+07	0,175E+02	0,1207E+05	0,3908E+10
0,316E+01	0,100E+07	0,152E+02	0,1660E+05	0,5333E+10
0,100E+02	0,100E+07	0,132E+02	0,2357E+05	0,7513E+10
0,316E+02	0,100E+07	0,102E+02	0,3283E+05	0,1031E+11
0,100E+03	0,100E+07	0,925E+01	0,5215E+05	0,1635E+11
0,316E+03	0,100E+07	0,127E+02	0,1330E+06	0,4212E+11
0,100E+04	0,100E+07	0,181E+02	0,5097E+06	0,1577E+12

ρ г см ⁻³	T К	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ кэВ ⁻¹
0,100E-02	0,316E+07	0,542E+02	0,7396E+04	0,7881E+10
0,316E-02	0,316E+07	0,514E+02	0,8942E+04	0,9518E+10
0,100E-01	0,316E+07	0,481E+02	0,1106E+05	0,1176E+11
0,316E-01	0,316E+07	0,459E+02	0,1394E+05	0,1480E+11
0,100E+00	0,316E+07	0,438E+02	0,1809E+05	0,1918E+11
0,316E+00	0,316E+07	0,405E+02	0,2403E+05	0,2543E+11
0,100E+01	0,316E+07	0,369E+02	0,3262E+05	0,3442E+11
0,316E+01	0,316E+07	0,336E+02	0,4547E+05	0,4783E+11
0,100E+02	0,316E+07	0,297E+02	0,6428E+05	0,6730E+11
0,316E+02	0,316E+07	0,244E+02	0,8916E+05	0,9263E+11
0,100E+03	0,316E+07	0,195E+02	0,1256E+06	0,1292E+12
0,316E+03	0,316E+07	0,164E+02	0,1919E+06	0,1957E+12
0,100E+04	0,316E+07	0,188E+02	0,4187E+06	0,4243E+12
0,100E-02	0,100E+08	0,798E+02	0,2287E+05	0,7764E+11
0,316E-02	0,100E+08	0,780E+02	0,2657E+05	0,9017E+11
0,100E-01	0,100E+08	0,759E+02	0,3162E+05	0,1073E+12
0,316E-01	0,100E+08	0,725E+02	0,3874E+05	0,1313E+12
0,100E+00	0,100E+08	0,690E+02	0,4867E+05	0,1649E+12
0,316E+00	0,100E+08	0,655E+02	0,6280E+05	0,2125E+12
0,100E+01	0,100E+08	0,643E+02	0,8429E+05	0,2851E+12
0,316E+01	0,100E+08	0,633E+02	0,1187E+06	0,4012E+12
0,100E+02	0,100E+08	0,586E+02	0,1689E+06	0,5699E+12
0,316E+02	0,100E+08	0,519E+02	0,2408E+06	0,8095E+12
0,100E+03	0,100E+08	0,443E+02	0,3440E+06	0,1151E+13
0,316E+03	0,100E+08	0,360E+02	0,4883E+06	0,1620E+13
0,100E+04	0,100E+08	0,285E+02	0,7089E+06	0,2327E+13
0,100E-02	0,316E+08	0,900E+02	0,8800E+05	0,9456E+12
0,316E-02	0,316E+08	0,899E+02	0,9680E+05	0,1040E+13
0,100E-01	0,316E+08	0,895E+02	0,1084E+06	0,1164E+13
0,316E-01	0,316E+08	0,880E+02	0,1245E+06	0,1337E+13
0,100E+00	0,316E+08	0,863E+02	0,1462E+06	0,1570E+13
0,316E+00	0,316E+08	0,848E+02	0,1763E+06	0,1892E+13
0,100E+01	0,316E+08	0,829E+02	0,2195E+06	0,2356E+13
0,316E+01	0,316E+08	0,822E+02	0,2837E+06	0,3043E+13
0,100E+02	0,316E+08	0,820E+02	0,3850E+06	0,4130E+13
0,316E+02	0,316E+08	0,811E+02	0,5497E+06	0,5891E+13
0,100E+03	0,316E+08	0,766E+02	0,8047E+06	0,8607E+13
0,316E+03	0,316E+08	0,682E+02	0,1176E+07	0,1253E+14
0,100E+04	0,316E+08	0,613E+02	0,1814E+07	0,1922E+14

ρ г см ⁻³	T K	Z	σ Ом ⁻¹ см ⁻¹	χ Вт см ⁻¹ КВ ⁻¹
0,100E-02	0,100E+09	0,917E+02	0,3983E+06	0,1355E+14
0,316E-02	0,100E+09	0,913E+02	0,4277E+06	0,1454E+14
0,100E-01	0,100E+09	0,906E+02	0,4638E+06	0,1577E+14
0,316E-01	0,100E+09	0,902E+02	0,5062E+06	0,1721E+14
0,100E+00	0,100E+09	0,901E+02	0,5579E+06	0,1897E+14
0,316E+00	0,100E+09	0,900E+02	0,6246E+06	0,2124E+14
0,100E+01	0,100E+09	0,900E+02	0,7136E+06	0,2426E+14
0,316E+01	0,100E+09	0,900E+02	0,8371E+06	0,2846E+14
0,100E+02	0,100E+09	0,900E+02	0,1016E+07	0,3453E+14
0,316E+02	0,100E+09	0,899E+02	0,1285E+07	0,4366E+14
0,100E+03	0,100E+09	0,897E+02	0,1706E+07	0,5796E+14
0,316E+03	0,100E+09	0,885E+02	0,2389E+07	0,8105E+14
0,100E+04	0,100E+09	0,851E+02	0,3506E+07	0,1187E+15

ГЛАВА 11

ССЫЛКИ

- ABER, *Progr. Theor. Phys.* **22** (1959) 213.
- AHLEN S. P., *Rev. Mod. Phys.* **52** (1980) 121.
- AKHMANOV S. A., EMEL'YANOV V. I., KOROTEEV, *Interaction of Strong Laser Radiation with Solids and Nonlinear Optical Diagnostics of Surfaces* (TEUBNER-TEXTE zur Physik, Vol. 24), Teubner, Leipzig, 1990.
- ALEKSEEV V. A., ЯКУБОВ И. Т., *Phys. Rep.* **96** (1983) 1.
- ANDERS S., ANDERS A., *Contrib. Plasma Phys.* **29** (1989) 537
- ANDERS S., ANDERS A., *J. Phys. D* **21** (1988) 213.
- ANDERSEN H. H., ZIEGLER J. F., *Hydrogen Stopping Power and Ranges in All Elements*, Pergamon Press, New York, 1977.
- ANDERSON P. W., *Phys. Rev.* **109** (1958) 1492.
- ARISTA N. R., BRANDT W., *Phys. Rev. A* **23** (1981) 1898.
- ARISTA N. R., BRANDT W., *Phys. Rev. A* **29** (1984) 1471.
- ARISTA N. R., PIRIZ A. R., *Phys. Rev. A* **35** (1987) 3450.
- ARMSTRONG B. H., NICHOLLS R. W., *Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres*, Pergamon Press, Oxford, 1972.
- ARNDT S., KRAEFT W. D., SEIDEL J., *Phys. stat. sol. b* **194** (1996) 601.
- ARNOLD R. C., MEYER-TER-VEHN J., *Rep. Prog. Phys.* **50** (1987) 559.
- ASHCROFT N. W., LEKNER J., *Phys. Rev.* **145** (1966) 83.
- BALESCU R., *Statistical Mechanics of Charged Particles*, Interscience, New York, 1963.
- BARKER J. A., in: *Rare Gas Solids*, Vol. 1, M. L. Klein, J. A. Venables, Eds., Academic Press, New York, 1976.
- BATES D. R., KINGSTON A. E., MC WHIRTER R. W. P., *Proc. Ry. Soc. A* **267** (1962) 297.
- BAUER W., BLUHM H., GOEL B., *Preprint Inst. für Neutronenphysik und Reaktortechnik INR 1601*, Karlsruhe, 1988
- BAUMUNG K., BLUHM J. H., GOEL B., HOPPE P., KAROW H. U., RUSCH D., FORTOV V. E., KANEL G. I., RAZORENOV S. V., UTKIN A. V., VOROBYEV O. YU., *Laser and Particle Beams*, **14** (2), p. 181-209 (1996).
- BAUS M., HANSEN J. P., *Phys. Rep.* **59** (1980) 1.
- BECKE A. D., *Phys. Rev. A* **38** (1988) 3098.

- BESSIS N., BESSIS G., CORBEL G., DAKHAL B., *J. Chem. Phys.* **63** (1975) 3744.
- BETHE H., *Ann. Phys. (Leipzig)* **5** (1930) 325.
- BEULE D., EBELING W., FÖRSTER A., JURANEK H., NAGEL S., REDMER R., RÖPKE G., *Phys. Rev. B* **59** (1999) 14177.
- BEULE D., EBELING W., FÖRSTER A., JURANEK H., REDMER R., RÖPKE G., *Contrib. Plasma Phys.* **39** (1999) 21.
- BEULE D., EBELING W., FÖRSTER A., JURANEK H., REDMER R., RÖPKE G., *Phys. Rev. E* **63** (2001) 060202.
- BEULE D., EBELING W., FÖRSTER A., *Physica A* **241** (1997) 719.
- BOHM D., PINES D., *Phys. Rev.* **92** (1953) 609.
- BOHR N., *Phil. Mag.* **25** (1913) 10.
- BONITZ M., BORNATH T., FÖRSTER A., KREMP D., SCHLANGES M., in: *Irreversible Processes and Selforganization (TEUBNER-TEXTE zur Physik, Vol. 23)*, W. Ebeling, H. Ulbricht, Eds., Teubner, Leipzig, 1989, p. 179.
- BONITZ M., Thesis (Dr. rer. nat), Univ. Rostok, 1990.
- BORISKOV G. V., BYKOV A. I., IL'KAEV R. I., SELEMIR V. D., SIMAKOV G. V., TRUNIN R. F., URLIN V. D., SHUIKIN A. N. AND NELLIS W. J., *Phys. Rev B71* (2005) 092104.
- BORNATH T., EBELING W., KRAEFT W.-D., KREMP D., KILMANN K., Preprint Humboldt-Universität zu Berlin (Fachbereich Physik), Berlin, 1990.
- BORNATH T., SCHLANGES M., KREMP D., *Contrib. Plasma Phys.* **38** (1988) 1.
- BOTTCHER F., MUSIELOK J., KUNZE H.-J., *Phys. Rev. A* **36** (1987) 2265.
- BRACK M., GUET C., HAKANSSON M. B., *Phys. Rep.* **123** (1985) 275.
- BRANDES E.A., Ed., *Smithells Metals Reference Book*, 6-th edition, Butterworth and Co., London, 1983.
- BRANDT W., EDER L., LUNDQVIST S., *JQSRT* **185** (1967) 7.
- BRANDT W., LUNDQVIST S., *Phys. Rev. A* **139** (1965) 612.
- BRINKLEY S. R., *J. Chem. Phys.* **15** (1947) 107.
- BRUSH S. G., SAHLIN H. L., TELLER E., *J. Chem. Phys.* **45** (1966) 2102.
- BRYSK II., CAMPBELL P. M., HAMERLING P., *Plasma Phys.* **17** (1975) 473.
- BUNKER A., NAGEL S., REDMER R., RÖPKE G., *Phys. Rev B* **56** (1997) 3094; *Contr. Plasma Phys.* **37** (1997) 115.
- CARNAHAN N. F., STARLING K. E., *J. Chem. Phys.* **51** (1969) 635.
- CARSON T. R., MAYERS D. R., STIBBS D. W. N., *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.* **140** (1968) 483.
- CEDILLO A., ROBLES J., GAZQUEZ J. L., *Phys. Rev. A* **38** (1988) 1697.
- CEPERLEY D. M., ALDER B. J., *Phys. Rev. B* **36** (1987) 2092.
- CEPERLEY D. M., ALDER B. J., *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 566.
- CEPERLEY D. M., ALDER B. J., *Physica B* **108** (1981) 875.
- CHABRIER G., ASHCROFT N. W., *Phys. Rev. A* **42** (1990) 2284.

- CHABRIER G., POTEKHIN A., *Phys. Rev. E* **68** (1998) 4941.
- CHIHARA J., *Prog. Teor. Phys.* **59** (1978) 76.
- COLLINS G. W., DA SILVA L. B., CELLIERS D. M., GOLD M., FOORD M. E., WALLACE R. J., NG A., WEBER S. V., BUDIL K. S. and CAUBLE R., *Science* **281** (1998) 1178.
- COLLINS L., KWON I., KRESS J., TROULLIER N. and LYNCH D., *Phys. Rev. E* **52** (1995) 6202.
- COWAN R. D., ASHKIN I., *Phys. Rev.* **105** (1957) 144.
- COX A. N., *Stellar Absorption Coefficients and Opacities*, in: *Stars and Stellar System*, L. H. Aller, D. B. McLaughlin, Eds., Vol. 8: *Stellar Struktur*, Univ. of Chicago Press, Chicago, 1965.
- CZERWON H. J., *Diplom Thesis, Wilhelm-Pieck-Universität Rostock*, 1972.
- DA SILVA L. B., CELLIERS P., COLLINS G. W., BUDIL K. S., HOLMES N. C., BARBEE T. W., HAMMEL B. A., KILKENNY J. D., WALLACE R. J., ROSS M., CAUBLE R., NG A., CHIU G., *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 483.
- DAPPEN W., in: *Progress of Seismology of the Sun and the Stars*, Y. Osaki, H. Shibahashi, Edn., Tokyo, 1989.
- DAPPEN W., MIHALAS D., HUMMER D. G., *Astrophys. J.* **332** (1988) 261.
- DE WITT H. E., *Phys. Rev. A* **14** (1976) 1290.
- DEBNEY B. T., *J. Phys. C* **10** (1977) 4719.
- DHARMA-WARD ANA M. W. C., PERROT F., *Phys. Rev. A* **26** (1982) 2082.
- DIENEMANN H., CLEMENS G., KRAEFT W. -D., *Ann. Physik (Leipzig)* **37** (1980) 444.
- DIRAC P. A. M., *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **26** (1930) 376.
- DRAWIN H. -W., EMARD F., *Physica C* **85** (1977) 333.
- DRAWIN H. -W., FELENBOK P., *Data for Plasmas in Local Thermodynamic Equilibrium*, Gauthier-Villars, Paris, 1965.
- DYSON F. J., LENARD A., *J. Math. Phys.* **8** (1967) 423.
- DYSON F. J., LENARD A., *J. Math. Phys.* **9** (1968) 698.
- EBELING K., FÖRSTER A., KREMP D., SCHLANGES M., *Physica A* **159** (1989) 285.
- EBELING W., KRAEFT W. -D., KREMP D., RÖPKE G., *Astrophys. J.* **290** (1985) 24.
- EBELING W., KRAEFT W. -D., KREMP D., RÖPKE G., *Physica A* **140** (1986b) 160.
- EBELING W. Z. *phys. Chem.* **271** (1990b) 233.
- EBELING W., *Ann. Physik (Leipzig)* **472** (1966) 415.
- EBELING W., *Ann. Physik (Leipzig)* **474** (1967) 104.
- EBELING W., *Ann. Physik (Leipzig)* **476** (1968) 315.
- EBELING W., *Ann. Physik (Leipzig)* **477** (1969) 383, 392.
- EBELING W., BLASCHKE D., REDMER R., REINHOLZ H., RÖPKE G., *Thermodynamics of dense hydrogen -- influence of Pauli blocking*. Contribution to NPP-2006, Moscow November 2006.
- EBELING W., *Contrib. Plasma Phys.* **29** (1989a) 165.

- EBELING W., *Contrib. Plasma Phys.* **30** (1990a) 553.
- EBELING W., ENGEL A., FEISTEL R., *Physik der Evolutionsprozesse*, Akademie-Verlag, Berlin 1990.
- EBELING W., FEISTEL R., *Physik der Selbstorganisation und Evolution*, Akademie-Verlag, Berlin, 1982; 2nd edition, 1986.
- EBELING W., FÖRSTER A., *High Press. Res.* **4** (1990) 484.
- EBELING W., FÖRSTER A., REDMER R., ROTHER T., SCHLANGES M., in: 18th Int. conf. Phen. in Ionized Gases (Swansea 1987). *Invited Papers*, V T. Williano, Ed., Adam Hilgor Publ., Bristol, 1987, p. 40.
- EBELING W., FÖRSTER A., RICHERT W., HESS H., *Physica A* **150** (1988) 159.
- EBELING W., FORTOV V.E., KLIMONTOVICH Yu.L., KOVALENKO N. P., KRAEFT W.-D., KRASNY Yu. P., KREMP D., KULIK P.P., RIABY V.A., RÖPKI G., ROZANOV E.K., SCHLANGES M., *Transport Properties of Dense Plasmas*, Akademie-Verlag, Berlin, 1983; Birkhauser, Basel, 1984.
- EBELING W., GRIGO M., *Ann. Physik (Leipzig)* **492** (1980) 21.
- EBELING W., HESS H., FÖRSTER A., RICHERT W., *Preprint Int. Centre Theor. Phys. IC/86/271, Miramare-Trieste*, 1986a.
- EBELING W., in: 75 Jahre Quantentheorie. *Abh. Akademie d. Wiss.* **7N** (1977) 149.
- EBELING W., in: *Inside the Sun. Proc. 121st Colloquium of the Int. Astron. Union (Versailles 1989)*, G. Berthoaieu, M. Cribier, Eds., Kluwer, Dordrecht, 1989b, p. 43.
- EBELING W., KILIMANN K., *Z. Naturforsch.* **44a** (1989) 519.
- EBELING W., KLIMONTOVICH Yu. L., *Selforganization and Turbulence in Liquids (TEUBNER-TEXTE zur Physik, Vol. 2)*, Teubner, Leipzig, 1984.
- EBELING W., KRAEFT W.-D., KREMP D., *Beitr. Plasmaphysik* **10** (1970) 237.
- EBELING W., KRAEFT W.-D., KREMP D., KILIMANN K., *Phys. stat. sol. (b)* **78** (1976b) 241.
- EBELING W., LEHMANN H., *Ann. Physik (Leipzig)* **500** (1988) 529.
- EBELING W., LEHMANN H., *Contrib. Plasma Phys.* **29** (1989) 365.
- EBELING W., LEIKE I., *Physica A* **170** (1991) 682.
- EBELING W., *Phys. stat. sol. (b)* **46** (1971) 243.
- EBELING W., *Physica* **43** (1969) 293.
- EBELING W., *Physica* **73** (1974) 573.
- EBELING W., *Physica A* **130** (1985) 523.
- EBELING W., RICHERT W., *Phys. Lett. A* **108** (1985b) 80.
- EBELING W., RICHERT W., *phys. stat. sol. (b)* **128** (1985a) 467.
- EBELING W., SANDIG R., *Ann. Physik (Leipzig)* **483** (1973) 289.
- ECKER G., BOTTICHER W., KJESER J., SCHINDLER H., *Das Niedertemperaturplasma. Ein Universalschlüssel zu neuen Märkten und Zukunftstechnologien*, VDI-Verlag, Dusseldorf, 1988.
- ECKER G., KROLL W., *Phys. Fluids* **6** (1963) 62.
- ELVERT G., *Ann. Phys. (Leipzig)* **426** (1939) 178.

- EVANS R., GYORFY B. L., SZABO N., ZIMAN J. M., in: *The Properties of Liquid Metals*, S. Tukeuchi, Ed., John Wiley, New York, 1973.
- EWALD P. P., *Ann. Physik* **369** (1921) 253.
- FALKENHAGEN H., *Theorie der Elektrolyte*, S. Hirzel, Leipzig, 1971.
- FEISTBL R., EBELING W., *Evolution of Complex Systems*, Kluwer Academic Publ., Dordrecht, 1989.
- FENG I. J., LAMOUREUX M., PRATT R. H., TSENG H. K., *Phys. Rev. A* **27** (1983) 3209.
- FERMI E., TELLER E., *Phys. Rev.* **72** (1947) 399
- FERMI E., *Z. Physik* **48** (1928) 73.
- FEYNMAN R. P., METROPOLIS N., TELLER E., *Phys. Rev.* **75** (1949) 1561.
- FILINOV A., GOLUBICHNYI V., BONITZ M., EBELING W., DUFTY J. W., *Phys. Rev. E* **70** (2004) 046411.
- FILINOV V. S., BONITZ M., LEVASHOV P. R., FORTOV V. E., EBELING W., SCHLANGES M., KOCH S. W., *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** (2003) 6069.
- FILINOV V. S., FORTOV V. E., BONITZ M., LEVASHOV P. R., *Plasma Phys. Control Fusion* **43** (2001) 745.
- FÖRSTER A., EBELING W., RICHERT W., in: *High Pressure Geosciences and Material Synthesis*, H. Vollstadt, Ed., Akademie-Verlag, Berlin, 1988, p. 84.
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., EBELING W., 28th Annual Meeting of the European High Pressure Research Group (EHPRG-28 Conf., Bordeaux 1990), *Contrib. S.* 14–P. 6.
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., EBELING W., *High Press. Res.* **7** (1991) 375.
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., EBELING W., in: 20th Int. Conf. Phen. Ionized Gases (Pisa 1991). *Contributed Papers*, 1991b, Vol. 2, p. 385.
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., in: *Proc. 11th Int. School on Quantum Statistics (QUAST II, Flessenow 1989)*, D. Blaschke, Ed., Universität Rostock, 1990a (in press).
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., personal communications, 1990b.
- FÖRSTER A., KAHLBAUM T., RICKERT A., *Z. Physik D. Suppl.* **21** (1991c) 171.
- FORTOV V., Charge and density coupling in nonideal plasmas, PNP-12, Darmstadt, September 2006.
- FORTOV V., LEBEDEV M., DYABILIN K., VOROBIEV O., SMIRNOV V., GRABOV-SKIJ E., in: *Shock Compression of Condensed Matter-1995*, ed by S. C. Schmidt, W. C. Tao, *AIP Conf. Proc.* **370**, p. 1255 (1996).
- FORTOV V. E., in: W. Ebeling et al., *Transport Properties of Dense Plasmas*, Birkhauser Verlag Basel, Boston, Stuttgart, 1984, p. 1.
- FRANCK J. P., DANIELS W. B., *Phys. Rev. Lett.* **44** (1980) 259.
- FRANCK S., *Adv. Space Res.* **1** (1981) 203.
- FRANCK S., *Ann. Physik (Leipzig)* **492** (1980) 349.
- GALAM S., HANSEN J. -P., *Phys. Rev. A* **14** (1976) 816.

- GATHERS G. R., *Int. J. Thermophys.* **4** (1983) 209.
- GELDART D. J. W., RASOLT M., *Phys. Rev. B* **13** (1976) 1477.
- GELDART D. J. W., SOMMER B., *Phys. Rev. B* **32** (1985) 7694.
- GEORGE E. P., OHANOTO K., NAKAMURA K., HAMADA T., *Aust. J. Phys.* **32** (1979) 223.
- GRABOSKE H. C., HARWOOD D. J., ROGERS F. J., *Phys. Rev.* **186** (1969) 210.
- GRANFILL C. H., MORE R. M., Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-7313-MS, Los Alamos, 1978.
- GRIEM H., *Plasma Spectroscopy*, McGraw Hill, New York, 1968.
- GRIMALDI F., GRIMALDI-LECOURT A., DHARMA-WARDANA M. W. C., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1063.
- GRYAZNOV V., IOSILEVSKIY I., FORTOV V., ZHERNOKLETOV M., MOCHALOV M., Equation of state and huginions of shock compressed gases on the basis of chemical model, PNP-12, Darmstadt, September 2006a.
- GRYAZNOV V. K., AYUKOV S. V., BATURIN V. A., IOSILEVSKIY I. L., STAROSTIN A. N. AND FORTOV V. E., *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** (2006b), 4329.
- GRYAZNOV V. K., IOSILEVSKI I. L., FORTOV V. E., In: *High-Pressure Shock Compression of Solids VII Shock Waves and Extreme States of Matter* Ed. By V. E. Fortov, L. V. Al'tshuler, R. F. Trunin, A. I. Funtikov, Springer-Verlag, (2004), 437.
- GRYAZNOV V. K., IOSILEVSKI I. L., FORTOV V. E., V. E., *Physics of Strongly Coupled Plasmas*, ed. by W. D. Kraeft, M. Schlanges, World Scientific, Singapore (1996) 351.
- GUNDEL H., *Beitr. Plasmaphys.* **10** (1970) 475.
- GUNDEL H., *Beitr. Plasmaphys.* **11** (1971) 1.
- GUNTHER K., RADTKE R., *Electric Properties of Weakly Nonideal Plasmas*, Akademie-Verlag, Berlin, 1984; Birkhauser, Basel, 1984.
- GUPTA A. K., SINGWI K. S., *Phys. Rev. B* **15** (1977) 1801.
- HAMADA T., *Austr. J. Phys.* **32** (1979) 223.
- HANSEN J. P., TORRIE G. M., VIEILLEFOSSÉ P., *Phys. Rev. A* **16** (1977) 2153.
- HANSEN J. P., *Phys. Lett. A* **41** (1972) 213.
- HANSEN J. P., *Phys. Rev. A* **8** (1973) 3096.
- HARONSKA P., KREMP D., SCHLANGES M., *Wiss. Z. W.-Pieck-Univ. Rostock, N-Reihe* **36** (1987) 98.
- HEMLEY R. J., MAO H. K., *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 857.
- HENSEL F., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **80** (1976) 786.
- HENSEL F., in: *Strongly Coupled Plasma Physics*, F. J. Rogers, H. E. DeWitt, Eds., Plenum, New York, 1987, p. 381.
- HENSEL F., in: *Trends in Physics 1984. Proc. 6th General Conf. EPS (Prague, 1984)*, J. Janta J. Pantoflíček, Eds., Union Czechoslovak Math. and Phys., Prague, 1984, p. 388.

- HESS H., *High Press. Res.* **1** (1989) 203.
- HESS H., *High Press. Res.* **4** (1990) 619.
- HESS H., KAHLBAUM T., in: *High Pressure Science and Technology*, N. V. Novikov, Ed., Naukova Dumka, Kiev, 1989, Vol. 3, p. 238.
- HITSCHKE L., RÖPKE G., *Phys. Rev. A* **38** (1989) 4991.
- HOFFMANN D. H. H., WEYRICH K., WAHL H., PETER T., MEYER-TER-VEHN J., JACOBY J., BIMBOT R., GARDES D., RIVET M. F., DUMAIL M., FLEURIER C., SANBA A., DEUTSCH C., MAYNARD G., NOLL R., HAAS R., ARNOLD R., MAUERMAN S., *Z. Phys. A* **330** (1988) 339.
- HOFFMANN D. H. H., MEYER-TER-VEHN J., MOLLER R. W., *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A* **278** (1989) 44.
- HOHENBERG P., KOHN W., *Phys. Rev.* **136** (1964) 864.
- HOHL D., NATOLI V., CEPERLEY D. M., MARTIN R. M., *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 541.
- HOLIAN K. S., Ed., T-4 Group, Report LA-10160-MS; SESAME # 3330, pp. 1-6, Los Alamos Nat. Lab., Los Alamos, 1984.
- HOLMES N. S., ROSS M., NELLIS W. J., *Phys. Rev. B* **52** (1995) 15835.
- HUBBARD J., *Proc. Roy. Soc. London A* **277** (1964) 237.
- HUBBARD W B., DE WITT H. E., *Astrophys. J.* **290** (1985) 388.
- HUBBARD W. B., SLATTERY W. L., *Astrophys. J.* **168** (1971) 131.
- HUEBNER WE, in: *Physics of the Sun*, P. A. Sturrock, Ed., Reidel, Dortrecht, 1986, Vol. 1.
- HUFF V. N., GORDON S., MORELL V. Z., NASA Report 1037, 1951.
- HUMMER D. C., MIHALAS D., *Astrophys. J.* **331** (1988) 794.
- ICHIMARU S., Ed., *Strongly Coupled Plasma Physics*, North-Holland Publ. Co., Amsterdam 1990.
- ICHIMARU S., IYETOMI H., OGATA S., *Astrophys. J.* **334** (1988) L17.
- ICHIMARU S., IYETOMI H., TANAKA S., *Phys. Rep.* **149** (1987) 91.
- ICHIMARU S., IYETOMI H., TANAKA S., *Phys. Reports*, **149** (1987) 91.
- ICHIMARU S., MITAKE S., TANAKA S., YAN X. -Z., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1768.
- ICHIMARU S., *Rev. Mod. Phys.* **54** (1982) 1017.
- ICHIMARU S., TANAKA S., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1790.
- INAGAKI T., ARAKAWA E. T., BIRKHOFF R. D., WILLIAMS M. W., *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5610.
- INGLIS D. R., TELLER E., *Astrophys. J.* **90** (1939) 439.
- JONES A. H., ISBELL W. H., MAIDEN C. J., *J. Appl. Phys.* **37** (1966) 3493.
- KAHLBAUM T., FÖRSTER A., *Fluid Phase Equilibria*, **76** (1992) 71.
- KAHLBAUM T., FÖRSTER A., *Laser Part. Beams* **8** (1990) 753.
- KAHLBAUM T., HESS H., in: *High Pressure Geosciences and Material Synthesis*, H. Vollstadt, Ed., Akademie-Verlag, Berlin, 1988, p. 90.

- KEELER R. K., VAN THIEL M., ALDER B. J., *Physica* **31** (1965) 1437
- KEELER R., VAN THIEL M., ALDER B., *Physica* **31** (1965) 1437.
- KELBG G., *Ann. Physik (Leipzig)* **469** (1964) 394.
- KELBG G., *Ann. Physik. (Leipzig)* **467** (1963) 219.
- KELLER J. U., *Thermodynamik der irreversiblen Prozesse*, de Gruyter, Berlin, 1977.
- KERLEY G. I., *Phys. Earth Planet Inter.* **6** (1972) 78.
- KERLEY G. I., In: *A Theoretical Equation of State for Deuterium*, National Technical Information Service, Springfield, VA, NTIS Document No. LA-47766 (1972).
- KIHARA T., AONO O., *J. Phys. Soc. Jap.* **18** (1963) 837.
- KILIMANN K., EBELING W., *Z. Naturforsch.* **45a** (1990) 613.
- KILIMANN K., KRAEFT W.-D., KREMP D., *Phys. Lett. A* **61** (1977) 393.
- KLAKOW D., TOEPFFER C., REINHARD P.-G., *Phys. Lett. A* **192**, 55 (1994); *J. Chem. Phys.* **101** (1994) 10766.
- KLIMONTOVICH Yu. L., KREMP D., KRAEFT W.-D., *Adv. Chem. Phys.* **LXVIII** (1987) 175.
- KLIMONTOVICH Yu. L., KREMP D., *Physica A* **109** (1981) 517.
- KNAUP M., REINHARD P., TOEPFFER C. *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 57 (1999).
- KNAUP M., REINHARDT P. G., TOEPFFER C., ZWICKNAGEL G., *J. Phys. A. Math. Gen* **36** (2003) 6165.
- KOHN W., SHAM L. J., *Phys. Rev.* **140** (1965) 1133
- KRAEFT W.-D., EBELING W., KREMP D., RÖPKE G., *Ann. Physik (Leipzig)* **500** (1988) 429.
- KRAEFT W.-D., KREMP D., KILIMANN K., DE WITT H. F., *Phys. Rev. A* **42** (1990) 2340
- KRAEFT W.-D., KREMP D., *Z. Physik* **208** (1968) 475.
- KREMP D., KRAEFT W.-D., *Ann. Phys. (Leipzig)* **475** (1968) 340
- KREMP D., KRAEFT W.-D., *Phys. Lett. A* **38** (1972) 167.
- KREMP D., SCHLANGES M., BORNATH T., BONITZ M. *Contrib. Plasma Phys.* **29** (1989) 511.
- KREMP D., SCHLANGES M., BORNATH T., *Phys. stat. sol. (b)* **147** (1988) 747.
- KREMP D., SCHLANGES M., BORNATH T., *Quantum Statistics of Nonequilibrium Systems Methods of Green's Functions (TEUBNER-TEXTE zur Physik, Vol.)*, Teubner, Leipzig, 1991 (in preparation)
- KRIENKE H., EBELING W., CZERWON H. J., *Wiss. Z. Univ Rostock, Math.-Nat. Reihe* **24** (1975) 5
- KUNZE H.-J., in: *Spectral Line Shapes*, Vol. 4, R. J. Exton, Ed., A Deepak Publishing, Hampton, 1987.
- LAMOUREUX M., FENG I. J., PRATT R. H., TSENG H. K., *JQSRT* **27** (1982) 227.
- LAMOUREUX M., PRATT R. H., in: *Proc. 2nd Int. Conf. on Radiative Properties of Hot Dense Matter*, J. David, Ch. Haaper, R. Lee, A. Merts, B. Rozsnayai, Eds., World Scientific, Singapore, 1983, p. 241.

- LAMPE M., Phys. Rev. **170** (1968a) 306.
LAMPE M., Phys. Rev. **174** (1968b) 276.
LANGRETT D., MEHL M., Phys. Rev. B **28** (1983) 1809.
LEBOWITZ J. L., LIEB E. H., Adv. Math. **9** (1972) 317.
LEBOWITZ J. L., LIEB E. H., Phys. Rev. Lett. **13** (1969) 631.
LEE P. H., Ph. D. Thesis, Univ. of Pittsburgh, 1977.
LEE Y. T., MORE R. M., Phys. Fluids **27** (1984) 1273.
LENOSKY T. J., BICKHAM S. R., KRESS J. D., COLLINS L. A., Phys. Rev. B **61** (2001) 1.
LETTER R., Phys. Rev. **99** (1955) 1854.
LIEB E. H., THIRRING W., Phys. Rev. Lett. **31** (1975) 111.
LIFSHITS I. M., Adv. Phys. **13** (1964) 483.
LINDHARDT J., Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **28** (1954) 8.
LINDHARDT J., WINTER A. K., Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **34** (1964) 1.
LOKKE W. A., GRASBERGER W. H., Lawrence Livermore Nat. Lab. Rep. UCRL-52276, 1977.
LOUBEYRE P., BESSON J. M., PINCEAUX J. P., HANSEN J. P., Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 1172.
MA S. K., BRUECKNER K., Phys. Rev. **165** (1968) 18.
MA C Q., SAHNI W., Phys. Rev. B **16** (1977) 4247.
MAGEE N. H., MERTS A. L., HUEBNER W. R., Astrophys. J. **196** (1975) 617.
MAGRO W. R., CEPERLEY D. M., PIERLONI C., BERNU B., Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 1240.
MAKSIMOV E. G., MAZIN I. I., RASHKEEV S. N., USPENSKI Yu. A., J. Phys. F **18** (1988) 833.
MANSOORI C. F., CARNAHAN V., STARLING K. E., LELAND T. W. Jr, J. Chem. Phys. **54** (1971) 1523.
MAO H. -K., HEMLEY R. J., Rev. Mod. Phys. **66** (1994) 671.
MARCH N. H., TOSI M. P., Coulomb Liquids, Academic Press, London, 1984.
MARLEY M. S., HUBBARD W. B., Icarus **73** (1988) 536.
MARSH S. P., Ed., LASL Shock Hugoniot Data, Univesrity of California Press, Berkeley- LA-London (1980).
MARTIN P., SCHWINGER J., Phys. Rev. **115** (1959) 1342.
MAYER H., HITEL B., in: Opt. Prop. and Elec. Cond. of Met. and Alloys, F. Abeled, Ed., Amsterdam, 1966, p. 46.
MAYER H., Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-647, Los Alamos, 1947.
MAYER J. E., J. Chem. Phys. **18** (1950) 1426.
MAYNARD G., DEUTSCH C., Phys. Rev. A **26** (1982) 665.
MC LENNAN J. A., J. Stat. Phys. **28** (1982) 521.
MC MAHAN A. K., SKRIVER H. L., JOHANSSON B., Phys. Rev. B **23** (1981) 5016.

- MCQUEEN R. G., MARSH S. P., *J. Appl. Phys.* **31** (1960) 1253.
- MENDEZ R. H., NIEMALA V. S., in: *Wolf-Rayet Stars, Observations, Physics, Evolution*, C. W. H. de Loore, A. J. Willie, Eds., Reidel, Dordrecht, 1982, p. 457.
- MERMIN N. D., *Phys. Rev.* **137** (1965) 1441.
- MESYATS G. A., FORTOV V. E., *Phys. Bl.* **46** (1990) no. 10, 383.
- MEYER-TER-VEHN J., ZITTEL W., *Phys. Rev. B* **37** (1988) 8674.
- MIHALAS D., DAPPEN W., HUMMER D. G., *Astrophys. J.* **331** (1988) 815.
- MILITZER B., CEPERLEY D., *Phys. Rev. E* **63** (2001) 066404.
- MILITZER B., POLLOCK D., *Phys. Rev. E* **61** (2000) 3470.
- MILLER J. C., *Phil. Mag.* **20** (1969) 1115.
- MINTSEV V. B., TERNOVOI V. YA., GRYAZNOV V. K., PYALLING A. A., FORTOV V. E., IOSILEVSKII I. L., In book: *Shock Compression of Condensed Matter-1999*, ed. by S. C. Shmidt, D. P. Dandekar, J. W. Forbes, Woolbury, New York, (2000) 987.
- MITAKE S., TANAKA S., YAN X. -Z., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1775.
- MON K. K., CHESTER G. V., ASHCROFT N. W., *Phys. Rev. B* **21** (1980) 2641.
- MONTROLL E. W., WARD J. C., *Phys. Fluids* **1** (1958) 55.
- MOORE Ch. E., *Atomic Energy Levels*, NBS Circular no. 467, National Bureau of Standards, Washington, 1949, 1952, 1958, Vol. I - III.
- MORE R. M., *JQRST* **27** (1982) 345.
- MOSS F., MC CLINTOCK P. V. E., Eds., *Noise in Nonlinear Dynamical Systems*, Vol. 1-3, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1989.
- MOSTOVYCH A. N., CHAN Y., LEHECHA T., A. SCHMITT A., SETHIAN J. D., *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 3870.
- MOTT N. F., *Phil. Mag.* **35** (1977) 111.
- MURPHY D. R., *Phys. Rev. A* **24** (1981) 1682.
- MUSCHIK W., *Aspects of Nonequilibrium Thermodynamics*, World Scientific Singapore, 1990.
- NARDI E., ZINAMON Z., *Phys. Rev. A* **20** (1979) 1197.
- NELLIS W. J., VAN THIEL M., MITCHELL A. C., *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 816.
- NELLIS W. J., WEIR S. T., MITCHELL A. C., *Phys. Rev. B* **59** (1999) 3434.
- NELLIS W., VAN THIEL M., MITCHELL A., *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 816.
- NELLIS W. J., HOLMES N. C., MITCHELL A. C., TRAINOR R. J., GOVERNO G. K., ROSS M., YOUNG D. A., *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1248.
- NELLIS W. J., MITCHELL A. C., VAN THIEL M., DEVINE G. J., TRAINOR R. J., BROWN N., *J. Chem. Phys.* **79** (1983) 1480.
- NG A., PARFENIUK D., CELLIERS P., DA SILVER L., MORE R. M., LEE Y. T., *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1595.
- NOZIERES P., PINES D., *Phys. Rev.* **111** (1958) 442.
- NOZIERES P., PINES D., *Phys. Rev.* **113** (1959) 1254.
- OERVIDS V. I., KOGAN V. I., Preprint Inst. Atom. Ener. N 2720. Москва, 1976.

- OGATA S., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **36** (1987) 5451.
PARRINELLO M., TOSI M.P., *Chem. Phys. Lett.* **64** (1979) 579.
PERDEW J.P., *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 1665.
PEREL V.I., ELIASHBERG G. M., *ЖЭТФ* **41** (1961) 886.
PERROT F., DHARMA-VARDANA M. W. C., *Phys. Rev. A* **30** (1984) 2619.
PERROT F., *Phys. Rev. A* **20** (1979) 586.
PERROT F., *Phys. Rev. A* **25** (1982a) 498.
PERROT F., *Phys. Rev. A* **26** (1982b) 1035.
PERROT F., *Phys. Scr.* **39** (1989) 332.
PIERLEONI C.D., CEPERLEY M., BERNU B., MAGRO W. R., *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 2145.
PIERLEONI C., CEPERLEY D. M., BERNU B., MAGRO W. R., *Phys. Rev. Lett.*, **73**(16), 2145-2149 (1994).
PLUMER M. L., GELDART D. J. W., *J. Phys. C* **16** (1983) 677.
POMRANING G. C., *The Equations of Radiation Hydrodynamics*, Pergamon Press, Oxford, 1973.
PRATT R. H., *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **27** (1987) 527.
RADOUSKY H. B., ROSS M., *Phys. Lett. A* **129** (1988) 43.
RAGAN Ch. E., III, *Phys. Rev. A* **29** (1984) 1391.
REDMER R., RÖPKE G., BEULE D., EBELING W., *Contrib. Plasma Phys.* **39** (1999) 25.
REDMER R., *Phys. Reports* **282** (1997) 35.
REDMER R., RÖPKE G., *Contrib. Plasma Phys.* **29** (1989) 343.
REDMER R., RÖPKE G., *Physica A* **130** (1985) 523.
REE F., ROSS M., YOUNG D. J. *Chem. Phys.*, **79** (1983) 1487.
RICHERT W., EBELING W., *Phys. stat. sol. (b)* **121** (1984) 633.
RICKERT A., MEYER-TER-VEHN J., *Laser Part. Beams* **8** (1990) 715.
RICKERT A., Report MPQ 148, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching, 1989.
RINKER G. A., Los Alamos Nat. Lab. Rep. LA-10404-MS, Los Alamos, 1985a.
RINKER G. A., *Phys. Rev. A* **37** (1988) 1284.
RINKER G. A., *Phys. Rev. B* **31** (1985b) 4207.
RINKER G. A., *Phys. Rev. B* **31** (1985c) 4220.
ROBNIK M., KUNDT W., *Astron. Astrophys.* **120** (1983) 227.
ROGERS F. A., *Astrophys. J.* **310** (1986) 723.
ROGERS F. A., *Phys. Rev. A* **10** (1974) 2441.
ROGERS F. A., *Phys. Rev. A* **38** (1988) 5007.
ROGERS F. A., *Phys. Rev. A* **4** (1971) 1145.
ROGERS F. J., DE WITT H. E., BOERCHER D., *Phys. Lett. A* **82** (1981) 331.
ROGERS F. J., WILSON B.G., IGLESIAS C. A., *Phys. Rev. A.* **38** (1988) 5007.
ROGERS F. J., Young D. A., *Phys. Rev. E* **56** (1997) 5876.

- ROGERS F. J., YOUNG D. A., DE WITT H. E., ROSS M., Phys. Rev. A **28** (1983) 2990.
- ROGERS F. J., GRABOSKE Jr. H. C., HARWOOD D. J., Phys. Rev. A **1** (1970) 1577.
- RÖPKE G., KILIMANN K., KRAEFT W.-D., KREMP D., Phys. Lett. A **68** (1978) 329.
- RÖPKE G., Phys. Rev. A **38** (1988) 3001.
- RÖPKE G., REDMER R., Phys. Rev. A **39** (1989) 907.
- ROSENFELD Y., Phys. Rev. A **26** (1982) 3622.
- ROSENFELD Y., Phys. Rev. A **33** (1986) 2025.
- ROSENFELD Y., Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 146.
- ROSS M., in: Materials of the Enrico Fermi School of Physics, 1989.
- ROSS M., MC MAHAN A. K., Phys. Rev. B **21** (1980) 1658
- ROSS M., Phys. Rev. B **54** (1986) R9589; *ibid.* **58** (1998) 669.
- ROSS M., REE F. H., J. Chem. Phys. **73** (1980) 6146.
- ROSS M., REE F. H., YOUNG D. A., J. Chem. Phys. **79** (1983) 1487.
- ROSS M., YOUNG D. A., Phys. Lett. A **118** (1986) 463.
- ROSS M., YOUNG D. A., Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1248.
- ROSS M., Phys. Rev. B, (1998) **58** 669.
- ROZSNYAI B. F., JQSRT **13** (1973) 1285.
- ROZSNYAI B. F., JQSRT **22** (1979) 337.
- ROZSNYAI B. F., JQSRT **27** (1982) 211.
- ROZSNYAI H. F., Phys. Rev. **145** (1972) 1137.
- SAHA M. N., Z. Phys. **6** (1921) 40.
- SAUMON D., CHABRIER C., Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2397.
- SAUMON D., CHABRIER G., Phys. Rev. A **44** (1991) 5122; **46** (1992) 2084.
- SAUMON D., CHABRIER G., WEIS J. J., J. Chem. Phys. **90** (1989) 7395.
- SCHLANGES M., BORNATH TH., Contrib. Plasma Phys. **29** (1989) 527.
- SCHLANGES M., KREMP D., Ann. Physik (Leipzig) **494** (1982) 69.
- SCHÖNHERR G., SCHMUTZLER R. W., HENSEL F., Phil. Mag. B **40** (1979) 411
- SCOTT J. M. C., Phys. Rev. A **6** (1973) 1853.
- SELDAM C. A., Proc. Phys. Soc. A **70** (1957) 97.
- SESAME'83, Report on the Los Alamos Equation-of-state Library. T4-Group, Los Alamos Nat. Lab. Rep. LALP-83-4, Los Alamos, 1983.
- SHALITIN D., STEIN J., RON A., Phys. Rev. A **29** (1984) 2789.
- SINGWI K. S., TOSI M. P., LAND R. H., SJOLANDER A., Phys. Rev. **176** (1968) 589.
- SLATER J. C., The Self-Consistent Field for Molecules and Solids, McGraw-Hill, New York, 1974.
- SOMMERFELD A., Atombau und Spektrallinien, Bd. 1-2, 7./3. Aufl., Vieweg-Verlag Braunschweig, 1949.
- SPITZER L., HARM R., Phys. Rev. **89** (1953) 977.
- STEIN J., SHALITIN D., RON A., Phys. Rev. A **31** (1985) 446.

- STEVENSON D. J., *Phys. Rev. B* **12** (1975) 3999.
- STOLZMANN W., BLÖCHER T., *Phys. Lett. A* **221** (1996) 99; *Astron. Astrophys.* **314** (1996) 1024.
- STOLZMANN W., EBELING W., *Phys. Lett. A* **248** (1998) 242.
- STOREY P. J., HUMMER D. G., *Mon. Nat. Royal Astr. Soc.* **231** (1988) 1139.
- TAGGERT D., SHUMANN L., BROWN H. H., *Phys. Fluids* **24** (1981) 1180.
- TANAKA S., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 3756.
- TANAKA S., MITAKE S., YAN X.-Z., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1779.
- TERNOVOI V. Y., FILIMONOV A. S., FORTOV V. E., KVITOV S. V., NIKOLAEV D. N., PYALLING A. A., *Physica B* **265** (1999) 6.
- THOMAS L. H., *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **23** (1926) 542.
- TSAKIRIS G. D., EIDMAN K., *JQSRT* **38** (1987) 353.
- URLIN V. D., MOCHALOV M. A., MIKHAILOVA O. L., *High Pressure research* **8** (1992) 595.
- VAN ODERHOVEN F. J. F., SCHRAM P. P. J. M., *Physica A* **133** (1985) 74.
- VAN THIEL M., Ed., *Compendium of shock wave data, Livermore Lawrence Laboratory Report UCRL-50108, v. 1-3* (1977).
- VASILEV V. A., ROMANOVSKII Yu. M., CHERNAVSKII D. S., YAKHINO V. G., *Autowave Processes in Kinetic Systems, Deutscher Verlag der Wissenschaften*, 1987.
- VITEL Y., *J. Phys. B* **20** (1987) 2327.
- VODOLAGA B. K., *High Press. Res.* **5** (1990) 819.
- VON STRAATEN J., SILVERA J. F., *Phys. Rev. B* **37** (1988) 1989.
- VOSKO S. H., WILK L., NUSAIR M., *Can. J. Phys.* **58** (1980) 1200.
- WAISMAN E., LEBOWITZ J. L., *J. Phys. Chem.* **56** (1972a) 3086.
- WAISMAN E., LEBOWITZ J. L., *J. Phys. Chem.* **56** (1972b) 3093.
- WALSH J. M., RICE M. H., MCQUEEN R. G., YARGER F. L., *Phys. Rev.* **108** (1957) 196.
- WANG J. S. Y., RASSOLT M., *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5330.
- WANG W.-P., PARR R. G., *Phys. Rev. A* **16** (1977) 891.
- WATSON W. D., *Astrophys. J.* **159** (1970) 653.
- WEIR S. T., MITCHELL A. C., NELLIS W. J., *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 1860.
- WEYRICH K., HOFFMANN D. H. H., JACOBY J., WAHL H., NOLL R., HAAS R., KUNZE H., BIMBOT R., GARDES D., RIVET M.-F., DEUTSCH C., FLEURIER C., *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A* **278** (1989) 52.
- WIGNER E. P., *Phys. Rev.* **40** (1932) 749.
- WILLIAMS R. H., DE WITT H. E., *Phys. Fluids* **12** (1969) 2326.
- WILSON J. R., *Metallurg. Rev.* **10** (1965) 381.
- YAN X.-Z., TANAKA S., MITAKE S., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1785.
- YOU X., ICHIMARU S., *Phys. Rev. A* **34** (1986) 2173.
- YOUNG D. A. UCRL-52352, LLNL, Univ. California (1977).

- YOUNG D. A., MC MAHAN A. K., ROSS M., Phys. Rev. B **24** (1981) 5119.
- YOUNG D. A., WOLFORD J. K., ROGERS F. J., HOLIAN K. S., Phys. Lett. A **108** (1985) 157.
- ZELDOVICH Ya. B., BARENULATT G. I., LIBROVICH V. B., MAKHVI-LADZE G. M., The Mathematical Theory of Combustion and Explosion, Consultants Bureau, New York, 1985.
- ZIMAN J. M., Principles of Theory of Solids, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1969.
- ZIMMERMAN G. P., MORE R. M., JQSRT **23** (1980) 517.
- ZIMMERMANN R., KILIMANN K., KRAEFT W.-D., KREMP D., RÖPKE G., Phys. stat. sol. (b) **90** (1978) 175.
- ZIMMERMANN R., Many-Particle Theory of Highly Excited Semiconductors (TEUBNER-TEXTE zur Physik, Vol. 18), Teubner, Leipzig, 1987.
- ZÜLICHE L., Quantenchemie — Ein Lehrgang, Vol. 1: Grundlagen und allgemeine Methoden, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1973.
- ZÜLICHE L., Quantenchemie — Ein Lehrgang, Vol. 2: Atombau, Chemische Bindung und molekulare Wechselwirkungen, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1985.
- АБРИКОСОВ А. А., ГОРЬКОВ Л. П., ДЗЯЛОШИНСКИЙ И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, ФИЗМАТЛИТ, Москва, 1962.
- АВРОРИН Е. Н., ВОДОЛАГА В. К., ВОЛКОВ Л. П., ВЛАДИМИРОВ А. С., СИМОНЕНКО В. А., ЧЕРНОВОЛЮК В. Т., Письма ЖЭТФ, **31** (1980) 727.
- АВРОРИН Е. Н., ВОДОЛАГА В. К., ВОЛОШИН Н. П., КУРОПАТЕНКО Б. Ф., КОБАЛЕНКО Г. В., СИМОНЕНКО В. А., ЧЕРНОВОЛЮК В. Т., Письма в ЖЭТФ **43** (1986) 241.
- АЛЕКСЕЕВ Ю. Л., РАТНИКОВ Б. П., РЫБАКОВ А. П., ПМТФ (1971) № 2 101.
- АЛЕКСАНДРОВ В. Е., ДРЕГАЛИН А. Ф., ТИШИН А. П., ХУДЯКОВ В. А., Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания, ВИНТИ, Москва, 1971.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., БАКАНОВА А. А., ТРУНИН Р. Ф., ЖЭТФ **42** (1962) 91.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., БРУСНИКИН С. Е., МАРЧЕНКО А. С., ТВТ **27** (1989) 636.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., БУШМАН А. В., ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., ЗУБАРЕВ В. Н., ЛЕОНТЬЕВ А. А., ФОРТОВ В. Е., ЖЭТФ **78** (1980) 741.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., КОРМЕР С. Б., БАКАНОВА А. А., ТРУНИН Р. Ф., ЖЭТФ **38** (1960a) 790.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., КОРМЕР С. Б., БРАЖНИК М. И., ВЛАДИМИРОВ Л. А., СПЕРАНСКАЯ М. П., ФУНТИКОВ А. И., ЖЭТФ **38** (1960b) 1061.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., ТРУНИН Р. Ф., КРУПНИКОВ К. К., ПАНОВ Н. В., УФН **166** (1996) 575-581.
- АЛЬТШУЛЕР Л. В., УФН, **85** (2), 197-258 (1965).
- АНИСИМОВ С. И., ПРОХОРОВ А. М., ФОРТОВ В. Е., УФН **142** (1984) 395.

- АНИСИМОВ С. И., ПРОХОРОВ А. М., ФОРТОВ В. Е., УФН 142 (1984) 395; 134 (1983) 1000.
- АЮКОВ С. В., БАТУРИН В. А., ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., СТАРОСТИН А. Н., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖЭТФ 80 (2004) 163.
- БАЙБУЗ В. Ф., ЗИЦЕРМАН В. Ю., ГОЛУБУШКИН Л. М., ЧЕРНОВ Ю. Г., Химическое равновесие в неидеальных системах, Под ред. В. С. Юнгмана, ИВТАН, Москва, 1985.
- БАКАНОВА А. А., ДУДОЛАДОВ И. П., СУТУЛОВ Ю. Н., ПМТФ. (1974) № 2 117.
- БАСКО М. М., ТВТ 23 (1985) 483.
- БАСКО М. М., Физика плазмы 10 (1984) 1195.
- БЕЛОВ С. И., БОРИСКОВ Г. В., БЫКОВ А. И., ИЛЬКАЕВ Р. И., ЛУКЬЯНОВ Н. Б., МАТВЕЕВ А. Я., МИХАЙЛОВА О. Л., СЕЛЕМИР В. Д., СИМАКОВ Г. В., ТРУНИН Р. Ф., ТРУСОВ И. П., УРЛИН В. Д., ФОРТОВ В. Е., ШУЙКИН А. Н., Письма в ЖЭТФ 76 (2002) 433.
- БЕРЕЗИН И. С., ЖИДКОВ И. П., Методы вычислений, Физматгиз, Москва, 1962.
- БЕРЕСТЕЦКИЙ В. Б., ЛИФШИЦ Е. М., ПИТАЕВСКИЙ Л. П., Релятивистская квантовая теория, Наука, Москва, 1968.
- БЕСПАЛОВ В. Е., ГРЯЗНОВ В. К., ДРЕМИН А. Н., ФОРТОВ В. Е., ЖЭТФ 69 (1975) 2059.
- БЕСПАЛОВ И. М., БУШМАН А. В., ЛЕШКЕВИЧ С. Л., ПОЛИЩУК А. Я., СЕВАЛЬНИКОВ А. Ю., ФОРТОВ В. Е., Препринт ИВТАН, № 1-281, Москва, 1989.
- БЕСПАЛОВ И. М., ПОЛИЩУК А. Я., Письма в ЖТФ 15 (1986) №. 2, 4.
- БЕСПАЛОВ И. М., ПОЛИЩУК А. Я., Препринт ИВТАН, № 1-257, Москва, 1988.
- БЕСПАЛОВ И. М., ПОЛИЩУК А. Я., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖТФ 16 (1990) №11, 80.
- БИБЕРМАН Л. М., ВОРОБЬКВ В. С., ЯКУБОВ И. Т., Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы, Наука, Москва, 1982.
- БИБЕРМАН Л. М., ТОПОРКИН Ю. Н., УЛЬЯНОВ К. Н., ЖТФ 32 (1962) 827.
- БОБРОВ В. Б., ТРИГЕР С. А., ЖЭТФ 86 (1984) 514.
- БРИН М. Е., ПАВЛОВ Б. В., Материалы Всесоюзного симпозиума «Математические методы в химии», СО АН СССР, Новосибирск, 1973, 185.
- БУШМАН А. В., КРАСЮК И. К., ПАШИН И. П., ПРОХОРОВ А. М., ТЕРНОВОЙ В. Я., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖЭТФ 39 (1984) 341.
- БУШМАН А. В., ЛОМАКИН Б. Н., СЕЧЕНОВ В. А., ФОРТОВ В. Е., ЩЕКОВ О. Е., ШАПИРДЖАНОВ И. И., ЖЭТФ 69 (1975) 1624.
- БУШМАН А. В., ЛОМОНОСОВ И. В., ФОРТОВ В. Е., Уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии, Черноголовка (1992).
- БУШМАН А. В., ФОРТОВ В. Е., УФН 140 (1983) 177.
- ВАЛУГВ А. А., МЕДВЕДЕВ И. Г., НОРМАН Г. Э., ЖЭТФ 59 (1970) 2228.
- ВЕДЕНОВ А. А., ЛАРКИН А. И., ЖЭТФ 36 (1959) 1133.

- ГИЛЛ П. Е., МЮРРЕЙ В., РАЙТ М. Х., Практическая оптимизация, Мир, Москва, 1985.
- ГИРШФЕЛЬДЕР Дж., КЕРТИС К., БЕРД Р., Молекулярная теория жидкостей и газов, ИИЛ, Москва 1961.
- ГЛЕМБОЦКИЙ Н., ПЕТКЯВИЧЮС Ю., Лит физ. сб. 13 (1973) 51.
- ГЛУХОДЕЛОВ В. Д., КИРШАНОВ С. И., ЛЕБЕДЕВА Т. С., МОЧАЛОВ М. А., ЖЭТФ 116 (1999) 551.
- ГОМБАШ П. Статистическая теория атома и ее применение, ИЛ, Москва 1951.
- ГРАНОВСКИЙ В. Л., Электрические токи в газах, Наука, Москва, 1971.
- ГРИГОРЬЕВ Ф. В., КОРМЕР С. Б., МИХАЙЛОВА О. Л., ТОЛОЧКО А. П., УРЛИН В. Д., ЖЭТФ 75 (1978) 1683.
- ГРИГОРЬЕВ Ф. В., КОРМЕР С. Б., МИХАЙЛОВА О. Л., МОЧАЛОВ М. А., УРЛИН В. Д., ЖЭТФ 88 (1985) 1271.
- ГРИГОРЬЕВ Ф. В., КОРМЕР С. Б., МИХАЙЛОВА О. Л., ТОЛОЧКО А. П., УРЛИН В. Д., Письма в ЖЭТФ 16 (1972) 286.
- ГРИГОРЬЕВ Ф. В., КОРМЕР С. Б., МИХАЙЛОВА О. Л., ТОЛОЧКО А. П., УРЛИН В. Д., ЖЭТФ 69 (1975) 743.
- ГРИМ Г. Уширение спектральных линий в плазме, Мир, Москва, 1978.
- ГРИЩЕЧКИН С. К., ГРУЗДЕВ С. К., ГРЯЗНОВ В. К., ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., ИЛЬКАЕВ Р. И., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., КАШИНЦЕВА Г. Н., КИРШАНОВ С. И., МАНАЧКИН С. Ф., МИНЦЕВ В. Б., МИХАЙЛОВ А. Л., МЕЖЕВОВ А. Б., МОЧАЛОВ М. А., ФОРТОВ В. Е., ХРУСТАЛЕВ В. В., ШУЙКИН А. Н. ЮХИМЧУК А. А., Письма ЖЭТФ, 80 (2004). 452.
- ГРЯЗНОВ В. К., ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., ЗУБАРЕВ В. Н., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., ЖЭТФ 78 (1980a) 573.
- ГРЯЗНОВ В. К., ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., СИМАКОВ Г. В., ТРУНИН Р. Ф., ТРУСОВ Л. И., ФОРТОВ В. Е. ЖЭТФ 114 (1998) 1242.
- ГРЯЗНОВ В. К., ИВАНОВА А. Н., ГУЦЕВ Г. Л., ЛЕВИН А. А., КРЕСТИНИН А. В., Журн. структ. хим 30 (1989) 132.
- 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, Атомиздат, Москва, 1980b.
- ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., В кн. Ударные волны и экстремальные состояния вещества, под ред. Фортова В. Е., Альтшулера Л. В., Трунина Р. Ф., Фунтикова А. И., Наука, Москва, (2000) 342.
- ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., в сб.: Уравнения состояния, под ред. Фортова В. Е., Москва, (1995) 38.
- ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., в сб.: Физика низкотемпературной плазмы, Петрозаводск, (1995). 105.

- ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., в сб.: Физика и техника плазмы, Минск, Изд.-во БГУ (1994) 1.
- ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖТФ 8 (1982) 1378.
- ГРЯЗНОВ В. К., ФОРТОВ В. Е., ТВТ 25 (1987) 1208.
- ГУРВИЧ Л. В., ВЕЙЦ И. В., МЕДВЕДЕВ В. А., ХАЧКУРУЗОВ Г. А., ЮНИМАН В. С., БЕРГМАН Г. А., БАЙБУЗ В. Ф., ЙОРИШ В. С., ЮРКОВ Г. Н., ГОРБОВ С. И., КУРАТОВА Л. Ф., РТИЩЕВА Н. П., ПРЖЕВАЛЬСКИЙ И. Н., ЗИЦЕРМАН В. Ю., ЛЕОНИДОВ В. Я., ЕЖОВ Ю. С., ТОМБЕРГ С. Е., НАЗАРЕНКО И. И., РОГАЦКИЙ А. Л., ДОРОФЕЕВА О. В., ДЕМИДОВА М. С., Термодинамические свойства индивидуальных веществ, Т. 1, Наука, Москва, 1978.
- ДЕ ГРООТ С., МАЗУР П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
- ДЖЕФФРИС К., КЕЛДЫШ Л., ред., Электронно-дырочные капли в полупроводниках; Наука, Москва, 1988.
- ДРАГАЛОВ В. В., НИКИФОРОВ А. Ф., НОВИКОВ В. Г., УВАРОВ В. Б., Препринт ИПМ АН СССР № 157, Москва, 1987.
- ДРАГАЛОВ В. В., НИКИФОРОВ А. Ф., НОВИКОВ В. Г., УВАРОВ В. Б., Препринт ИПМ АН СССР № 142, Москва, 1988.
- ДРАГАЛОВ В. В., НОВИКОВ В. Г., ТВТ 24 (1987) 1057.
- ЕЛИСЕЕВ Г. М., МОДЕЛЬ И. Ш., НАРОЖНЫЙ А. Т., НИКИФОРОВ А. Ф., НОВИКОВ В. Г., УВАРОВ В. Б., ХАРЧЕНКО А. И., ХОЛИН С. А., Доклады АН СССР 289 (1986) 850.
- ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., ЗУБАРЕВ В. Н., ТРУНИН Р. Ф., ФОРТОВ В. Е., Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии, Черногоровка, (1996).
- ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., Ред. Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ Саров, 2003.
- ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., МОЧАЛОВ М. А., Исследование кинетических и термодинамических свойств дейтерия и инертных газов при ударно-волновом и квазиэнтропическом сжатии, Научно-координационная Сессия «Исследования неидеальной плазмы», Москва, Ноябрь 2005.
- ЗАМАЛИН В. М., НОРМАН Г. Э., ФИЛИНОВ В. С., Метод Монте-Карло в статистической механике, Наука, Москва, 1977.
- ЗАПОРОЖЕЦ Ю. Б., МИЩЕВ В. Б., ФОРТОВ В. Е., БАТОВСКИЙ О. М., Письма в ЖТФ 10 (1984) №21, 133.
- ЗЕЛЕНЕР Б. В., НОРМАН Г. Э., ФИЛИНОВ В. С., ТВТ 10 (1972) 1160.
- ЗЕЛЕНЕР Б. В., НОРМАН Г. Э., ФИЛИНОВ В. С., Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической физике, Наука, Москва, 1981.
- ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., Ж. физ. хим. 11 (1938) 685.
- ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., РАЙЗЕР Ю. П., Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Физматгиз, Москва, 1966.

- ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., ФРАНК-КАМЕНЕЦКИЙ Д. А., Доклады АН СССР 19 (1938b) 693.
- ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., ФРАНК-КАМЕНЕЦКИЙ Д. А., Ж. физ. хим. 12 (1938a) 100.
- ЗУБАРЕВ В. Н., ПОДУРЕЦ М. А., ПОПОВ Л. В., СИМАКОВ Г. В., ТРУНИН Р. Ф., В сб. Детонация, Черногловка (1978) 61.
- ИВАНОВ Ю. В., МИНЦЕВ В. Б., ФОРТОВ В. Е., ДРЕМИН А. Н., ЖЭТФ 71 (1976) 216.
- ИВАНОВА А. Н., ГРЯЗНОВ В. К. Расчет атомов по методу Хартри-Фока, Отчет ОИХФ АН СССР, Черногловка 1975.
- ИМШЕНИК В. С., МИХАЙЛОВ И. Н., БАСКО М. М., МОЛОДЦОВ С. В., ЖЭТФ 90 (1986) 1669.
- ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ГРЯЗНОВ В. К., ТВТ 19 (1981) 1121.
- ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ТВТ 18 (1980) 447.
- ИОСИЛЕВСКИЙ И. Л., ТВТ 23 (1985) 1041.
- ИШИМАРУ С., Основные принципы физики плазмы, Атомиздат, Москва, 1975.
- КАДАНОВ Л. П., БЕЙМ Г. Квантовая статистическая механика, Мир, Москва, 1964.
- КАДОМЦЕВ Б. Б., Коллективные явления в плазме, 2-е изд., Наука, Москва, 1988.
- КАЛИТКИН Н. Н., ЖЭТФ, 38 (1960) 1534.
- КАЛИТКИН Н. Н., КУЗЬМИНА Л. В. ФТТ 13 (1971) 2314.
- КАЛИТКИН Н. Н., КУЗЬМИНА Л. В., Препринт № 35 ИПМ АН СССР, Москва (1975).
- КАЛИТКИН Н. Н., Математическое моделирование 1 (1989) 64.
- КАЛИТКИН Н. Н., РИТУС И. В., Препринт ИПМ АН СССР №72/1981, Москва, 1981.
- КАЛИТКИН Н. Н., Численные методы, Наука, Москва, 1978.
- КИРЖНИЦ Д. А., ШПАТАКОВСКАЯ Г. В., ЖЭТФ62 (1972) 2082; Препринт ФИАН им. П. Н. Лебедева, Москва 1998.
- КИРЖНИЦ Д. А., ЖЭТФ 32 (1957) 115.
- КИРЖНИЦ Д. А., ЖЭТФ 35 (1958) 1545.
- КИРЖНИЦ Д. А., ЛОЗОВИК Ю. Е., ШПАТАКОВСКАЯ Г. В., УФН 117 (1975) 3.
- КИРЖНИЦ Д. А., Полевые методы теории многих частиц, Атомиздат, Москва, 1963.
- КИРЖНИЦ Д. А., Труды ФИАН 16 (1961) 3.
- КЛИМОНТОВИЧ Ю. Л., Кинетическая теория неидеальных газов и неидеальной плазмы, Наука, Москва, 1975.
- КЛИМОНТОВИЧ Ю. Л., Кинетическая теория электромагнитных процессов, Наука, Москва, 1980.
- КЛИМОНТОВИЧ Ю. Л., Статистическая физика, Наука, Москва, 1982.
- КОВАЛЕНКО Н. П., КРАСНЫЙ Ю. П., ТРИГЕР С. А., Статистическая теория жидких металлов, Наука, Москва, 1990.
- КОГАН В. И., КУКУШКИН А. В., Письма в ЖЭТФ 37 (1983) 272.

- КОЛМОГОРОВ А. Н., ПЕТРОВСКИЙ Л. Г., ПИСКУНОВ Н. С., Вестник Московского университета, Секция А, Т. 1, № 6 (1937) 1.
- КОМПАНЕЕЦ А. С., ПАВЛОВСКИЙ Е. С., ЖЭТФ 31 (1956) 427.
- КОПЫШЕВ В. П., ЖЭТФ 55 (1968) 1304.
- КОПЫШЕВ В. П., Числ. методы мех. спл. сред 8 (1977) 54.
- КОРМЕР С. Б., ФУНТИКОВ А. И., УРЛИН В. Д., КОЛЕСНИКОВА А. Н., ЖЭТФ 42 (1962) 686.
- КРАСНИКОВ Ю. Г., ЖЭТФ 53 (1967) 2223.
- КРЕФТ В.-Д., КРЕМН Д., ЭБЕЛИНГ В., РЕПКЕ Г., Квантовая статистика систем заряженных частиц, Мир, Москва, 1988.
- КУДРИН Л. П., Статистическая физика плазмы, Атомиздат, Москва, 1974.
- КУМАХОВ М. А., КОМАРОВ Ф. Ф., Энергетические потери и пробег ионов в твёрдых телах. Изд-во БГУ Минск 1979.
- ЛАНДАУ Л. Д., ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., Acta physicochim USSR 18 (1943) 194.
- ЛАНДАУ Л. Д., ЗЕЛЬДОВИЧ Я. Б., ЖЭТФ, 14, 32 (1944).
- ЛАНДАУ Л. Д., ЛИФШИЦ Е. М., Квантовая механика, 4-е изд., Наука, Москва, 1989.
- ЛАНДАУ Л. Д., ЛИФШИЦ Е. М., Статистическая физика, 3-е изд., Наука, Москва, 1976.
- ЛАНДАУ Л. Д., ЛИФШИЦ Е. М., Теория поля, 7-е изд., Наука, Москва, 1988.
- ЛАНДАУ Л. Д., ЛИФШИЦ Е. М., Электродинамика сплошных сред, 2-е изд., Наука, Москва, 1982.
- ЛАРКИН А. И., ЖЭТФ 38 (1960) 1896.
- ЛЕШКЕВИЧ С. Л., СКВОРЦОВ В. А., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖТФ 15 (1989) №22, 39.
- ЛИКАЛЬТЕР А. А., Доклады АН СССР 259 (1981) 96; УФН 161 (1992) 119.
- ЛИКАЛЬТЕР А. А., ЖЭТФ 56 (1969) 240.
- ЛИКАЛЬТЕР А. А., ТВТ 22 (1984) 258.
- ЛИФШИЦ Е. М., ПИТАЕВСКИЙ Л. П., Физическая кинетика, Наука, Москва, 1979.
- ЛОМАКИН Б. Н., ФОРТОВ В. Е., ЖЭТФ 63 (1972) 92.
- ЛУНДКВИСТ С., МАРЧ Н. Х., Теория неоднородного электронного газа, Мир, Москва, 1987.
- МАЕВ С. А., ЖТФ 40 (1970) 567.
- МАО П. К., NEMLEY R. J., Science 244 (1989) 1462.
- МАСКЕ W., Z. Naturforsch. 5a (1950) 192.
- МИНЦЕВ В. Б., ФОРТОВ В. Е., Письма в ЖЭТФ 30 (1979) 401.
- МОДЕЛЬ И. Ш., НАРОЖИШЬИЙ А. Т., ХАРЧЕНКО А. И., ХОЛИН С. А., ХРУСТАЛЕВ В. В., Письма в ЖЭТФ 41 (1985) 270.
- МОТТ Н. Ф., Переходы металл-изолятор; Наука, Москва, 1979.

- НИКИФОРОВ А. Ф., ОРЛОВ Н. Ю., УВАРОВ В. Б., *Вопр. Атомн. Науки и Техники* (Серия: Методики и программы) **196** (1975) 617.
- НИКИФОРОВ А. Ф., УВАРОВ В. Б., *Докл. АН СССР* **191** (1970) 47.
- НИКИФОРОВ А. Ф., ОРЛОВ Н. Ю., УВАРОВ В. Б., *Препринт ИПМ АН СССР* №114, Москва, 1982.
- НОВИКОВ В. Г., *Препринт ИПМ АН СССР* №133, Москва, 1985.
- НОРМАН Г. Э., СТАРОСТИН А. Н., *ТВТ* **6** (1968) 410.
- НОРМАН Г. Э., СТАРОСТИН А. Н., *ТВТ* **8** (1970) 413.
- ПОЛАК Л. С., МИХАЙЛОВ А. С., *Самоорганизация в неравновесных физико-химических системах*, Наука, Москва, 1983.
- ПОЛИЩУК А. Я., *Solid State Commun.* **61** (1987) 193.
- ПОЛИЩУК А. Я., *Письма в ЖТФ* **15** (1989b) №10, 24.
- ПОЛИЩУК А. Я., *Препринт ИВТАН* №1-197, Москва, 1986.
- ПОЛИЩУК А. Я., *Препринт ИВТАН* №1-267, 1989а.
- ПОЛИЩУК А. Я., *ТВТ* **28** (1990) 877.
- ПОЛИЩУК А. Я., ФОРТОВ В. Е., ХЛОПОНИН В. С., *Письма в ЖТФ* **15** (1989) №19, 68.
- ПОЛИЩУК А. Я., ФОРТОВ В. Е., ХЛОПОНИН В. С., *Физика плазмы*, **17** (1990) 899.
- ПОЛИЩУК А. Я., ХЛОПОНИН В. С., *ЖТФ* **60** (1990) №8, 1.
- ПРОХОРОВ А. М., АНИСИМОВ С. И., ПАШИНИН П. П., *УФН* **119** (1976) 401.
- РАДЦИГ А. А., СМІРНОВ Б. М., *Параметры атомов и атомных ионов. Справочник*, 2-е изд., Энергоатомиздат, Москва 1986.
- РАЙЗЕР Ю. П., *ЖЭТФ* **36** (1959а) 1583.
- РАЙЗЕР Ю. П., *ЖЭТФ* **37** (1959b) 1079.
- РАЙЗЕР Ю. П., *Физика газового разряда*, Наука, Москва, 1987.
- РАШЕВСКИЙ П. К., *Дифференциальная геометрия*, Гостехиздат, Москва, 1956.
- СИМОНЕНКО В. А., ВОЛОШИН Н. П., ВЛАДИМИРОВ А. С., НАГИБИН А. П., НОГИН В. Н., ПОПОВ В. А., САЛЫНИКОВ В. А., ШОЙДИН Ю. А., *ЖЭТФ* **88** (1985) 1452.
- СИМОНЕНКО В. А., СИНЬКО Г. В., *ТВТ* **26** (1988) 864.
- СИНЬКО Г. В., *ТВТ* **21** (1983) 1041.
- СМІРНОВ Б. М., *УФН* **124** (1978) 201.
- СПИТЦЕР Л. *Физика полностью ионизованного газа (2-е изд.)*, Мир, Москва, 1965.
- ТЕЙЛОР ДЖ. *Теория рассеяния: Квантовая теория нерелятивистских столкновений*, Мир, Москва, 1975.
- ТРУБИЦЫН В. П., УЛИНИЧ Ф. П., *Доклады АН СССР* **142** (1962) 578.
- ТРУНИН Р. Ф., СИМАКОВ Г. В., *ЖЭТФ* **103** (1993) 2180.
- ТРУНИН Р. Ф., СИМАКОВ Г. В., СУТУЛОВ Ю. Н., МЕДВЕДЕВ А. В., РОГОЗКИН Б. Д., ФЕДОРОВ Ю. Е., *ЖЭТФ* **96** (1989) 1024.

- ФОРТОВ В. Е., ЛЕОНТЬЕВ А. А., ДРЕМИН А. Н., ГРЯЗНОВ В. К., ЖЭТФ 71 (1976) 225.
- ФОРТОВ В. Е., МИНЦЕВ В. Б., ГРЯЗНОВ В. К., ЖЭТФ 79 (1980) 116.
- ФОРТОВ В. Е., ТЕРНОВОЙ В. Я., ЖЕРНОКЛЕТОВ М. В., МОЧАЛОВ М. А., МИХАЙЛОВ А. Л., ФИЛИМОНОВ А. С., ПЯЛЛИНГ А. А., МИНЦЕВ В. Б., ГРЯЗНОВ В. К., ИОСИЛЪВСКИЙ И. Л., ЖЭТФ 124 (2003) 288.
- ФОРТОВ В. Е., УФН 138 (1982) 361.
- ФОРТОВ В. Е., ЯКУБОВ И. Т., Неидеальная плазма, Энергоатомиздат, Москва (1994).
- ФОРТОВ В. Е., ЯКУБОВ И. Т., Физика неидеальной плазмы, ИХФЧ РАН, Черноголовка, 1984.
- ХАРТРИ Д., Расчеты атомных структур, ИИТ, Москва, 1960.
- ХРАПАК А. Г., ЯКУБОВ И. Т., Электроны в плотных газах и плазме, Наука, Москва, 1981.
- ШКЛОВСКИЙ Б. И., ЭФРОС А. Л., Электронные свойства легированных полупроводников, Наука, Москва, 1979.
- ЭБЕЛИНГ В., КРЕФТ В. -Д., КРЕМП Д., Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле, Мир Москва, 1979.
- ЭККЕР Г., Теория полностью ионизованной плазмы, Мир, Москва, 1974.
- ЯКУБ Е. С. ТВТ 28 (1990) 664; Physica B, 265 (1999) 31.

Предметный указатель

- Адиабатическое приближение, 12
Амбиполярная диффузия, 71, 127
Аппроксимации Якоби-Паде, 43, 57, 80, 119
- Биномиальное распределение, 110, 113
Борновское приближение, 67, 228, 256
- Внутренняя энергия, 34, 54, 69
Второй вириальный коэффициент, 28, 90
Выражение Мансури для твердых сфер, 28, 82, 131
- Градиентная динамика, 139
- Данные SESAME, 114, 252
Двойной электрический слой, 78
Дебаевский сдвиг энергетического уровня, 35, 54
Дебаевское приближение в большом каноническом ансамбле, 169
Диаграмма свободной энергии, 142
Диаграммы Фейнмана, 34, 188
Динамическая поляризуемость, 246
Длина Ландау, 21
- Закон Дебая, включающий квантовые поправки, 39, 43, 82, 109
Закон Клазиуса-Клапейрона, 85
Закон Кулона, 17
Закон действующих масс, 69, 74, 149, 159
Заселенность возбужденных энергетических уровней, 119
- Ионизация давлением, 104, 109, 197, 200, 206
- Квантовая вириальная функция, 41
Квантово-статистическая модель Киржнитса, 15, 178, 244
Кинетические уравнения, 64
Классический флюид Кулона, 30
Кластерное разложение, 18, 36
Кольцевое приближение, 52, 206
Коэффициент Гонта, 221, 231, 240
Коэффициент ионизации, 62, 67, 120
Коэффициент непрозрачности по Планку, 246
Коэффициент непрозрачности по Россланду, 244, 246
Коэффициент спектрального поглощения, 228
Критерий Инглиза-Теллера, 199
Кулоновский логарифм, 214, 256
- Лестничное приближение, 36
- Масс-симметричная плазма, 22
Мапубаровское представление, 34
Метод Ньютона, 145
Метод Ньютона-Рафсона, 102
Метод Хартри-Фока, 16, 21, 169
Метод Хартри-Фока-Слэтера, 16, 169, 178, 250
Метод разложения по градиентам, 178
Метод разложения по термодинамическим фугитивностям, 26
Метод разложения по функциям, 26
Модель Томаса-Ферми, 15, 18, 169, 178

- Модель Хаббарда, 203
 Модель ограниченного атома, 164, 169, 178
 Модель однородного перемешивания, 46, 52
 Модель усредненного атома, 109, 195, 207, 243
 Модель экранированного водорода, 110, 195, 214, 243

 Область состояний слабой ионизации, 93, 104
 Обменно-корреляционная энергия, 32, 39, 43, 80, 178
 Образование капельки, 131, 138
 Однофлюидная модель, 46

 Параметр вырождения, 21
 Параметр корреляции, 20, 48, 206
 Переход Андерсона, 201
 Переход диэлектрик-металл, 85, 93, 100, 198
 Перколяционный подход, 200
 Плазменный фазовый переход, 77, 80, 88, 93, 100, 105, 136, 140
 Планеты-гиганты, 12, 84, 87, 145
 Показательная функция потенциала $\exp -6$, 28, 90
 Потенциал Левинарда-Джонса, 27
 Правило Бриллюэна-Планка-Ларкина, 27, 39, 75, 79
 Правило Слэтера, 102
 Приближение Борна-Элверта, 231
 Приближение для жестких сдвигов, 69
 Приближение случайной фазы, 18, 34, 188
 Процессы рассеяния, 64, 72, 214, 255, 259

 Радиус атомов и ионов, 24, 27, 83, 87, 90, 102, 109, 136, 164, 174, 198
 Расчеты методом Монте-Карло, 18, 30, 49, 82, 189

 Реакционно-диффузионное уравнение, 71, 127
 Ридберговские состояния, 116, 198

 Скорости изменения заселенности энергетических уровней, 119
 Солнце, 23, 87, 97
 Соотношение Максвелла, 77, 93
 Средне-сферическое приближение, 18, 31, 52
 Средний заряд тяжелых частиц, 74, 90, 102, 109, 206, 342
 Суммарный химический потенциал, 76, 93, 140

 Теорема Купмана, 197
 Теория Чепмсна-Энскога, 72
 Теория вариаций для флюидов, 27
 Теория линейного отклика, 216
 Теория функционала плотности, 15, 18, 178
 Теплопроводность, 214, 342
 Тормозная способность, 255, 259
 Тормозное излучение, 228
 Точный состав плазмы, 244
 Трехчастичная рекомбинация, 62, 68

 Уменьшение энергии ионизации, 58, 69, 75, 145, 169, 198
 Уравнение Бете-Голдстоуна, 117
 Уравнение Бете-Солпитера, 55
 Уравнение Дайсона, 34
 Уравнение Эйнштейна-Фоккера-Планка, 140
 Уравнение состояния, 36, 39, 76, 93, 104, 145, 169, 178
 Уравнения Саха, 17, 69, 75, 90, 110, 149, 159, 206

 Фотонная фабрика, 98
 Фотопроводимость, 228
 Фронты ионизации, 127
 Функция Грина, 34

- Функция распределения, 75, 149, 158, 167, 171, 174, 206
- Электрон-ионная плазма, 22, 77, 138
- Электропроводность, 214, 228, 342
- Электрохимический потенциал, 78
- Эффект блокировки вследствие принципа Паули, 24, 54, 60, 116
- Эффект исключенного объема, 30, 82, 102
- Ячеечное приближение Вигнера-Зейтца, 15, 178, 198, 246, 262

Интересующие Вас книги нашего издательства можно заказать почтой или электронной почтой:

subscribe@rcd.ru

Внимание: дешевле и быстрее всего книги можно приобрести через наш Интернет-магазин:

<http://shop.rcd.ru>

Книги также можно приобрести:

1. Москва, ИМАШ, ул. Бардина, д. 4, корп. 3, к. 414, тел. 135-54-37
2. МГУ им. Ломоносова (ГЗ, 1 этаж)
3. Магазины:

Москва: «Дом научно-технической книги» (Ленинский пр., 40)

«Московский дом книги» (ул. Новый Арбат, 8)

«Библиоглобус» (м. «Лубянка», ул. Мясницкая, 6)

Квижный магазин «ФИЗМАТКНИГА» (г. Долгопрудный,
Новый корпус МФТИ, 1 этаж, тел. 409-93-28)

С.-Пб.: «С.-Пб. дом книги» (Невский пр., 28)

*Вернер Эбелинг, Андреас Фёрстер, Владимир Евгеньевич Фортков,
Виктор Константинович Грязнов, Александр Яковлевич Полищук*

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГОРЯЧЕЙ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ

Дизайнер А. В. Луговая

Технический редактор А. В. Ширококов

Компьютерный набор и верстка Д. В. Панкратов, М. Г. Худенко

Корректор Г. Г. Тетерина

Подписано в печать 23.12.2007. Формат 60 × 84¹/₁₆.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 23,25. Уч. изд. л. 23,12.

Гарнитура Таймс. Бумага офсетная №1. Заказ №22.

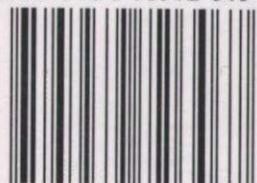
Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика»

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

<http://shop.rcd.ru> E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: (+73412) 500-295

Переплет выполнен в ГУП УР «Ижевский полиграфический комбинат»
426039, г. Ижевск, Воткинское шоссе, 180.

ISBN 978-5-93972-646-7



9 785939 726467