О САМОСОГЛАСОВАННОМ ПОТЕНЦИАЛЕ ПЛОТНОЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

Б. Н. Баранов, И. П. Павлоцкий

(*Москва*)

Рассматривается получение самосогласованного потенциала плотной низкотемпературной плазмы.

На решение уравнения Пуассона — Больцмана накладываются дополнительные условия самосогласованности.

Показывается, что точное решение не может быть самосогласованным. Предлагается приближенное самосогласованное решение.

Существующая теория плазмы основана на приближении Дебая — Хюккеля, которое предполагает, что энергия взаимодействия частиц плазмы значительно меньше кинетической энергии их относительного движения. Это дает возможность рассматривать плазму как газ, слабо отклоняющийся от идеального, и произвести линеаризацию уравнения Пуассона — Больцмана для потенциала.

Однако представляет интерес рассмотреть случаи, когда это не имеет места. Например, при изучении плотной низкотемпературной плазмы ($n'_e \sim 10^{18}$ $см^{-3}$, $KT \sim 1eV$) потенциальная энергия взаимодействия частиц сравнивается по порядку величины с их кинетической энергией. Понятно, что линеаризация в том случае невозможна. Поэтому делались попытки получить точное решение уравнения Пуассона — Больцмана [1, 2]. Однако крупным недостатком таких решений являлось неизбежное нарушение условий самосогласованности потенциала [2].

Запишем эти условия в следующем виде:

$$\frac{\partial \Phi_{0\alpha}}{\partial Z_\beta} - \frac{\partial \Phi_{0\beta}}{\partial z_\alpha} - 0, \qquad \frac{\Phi_\alpha}{Z_\alpha} - \frac{\Phi_\beta}{Z_\beta} = 0 \tag{1}$$

где Φ_α — потенциал, создаваемый частицей сорта α с учетом экранирующего действия других частиц плазмы; $\Phi_{0\alpha}$ — потенциал, действующий на частицу сорта α со стороны всех других частиц; Z_α — заряд частицы сорта α. Тогда $\Phi = \Phi_0 + \mu$, где $\mu(r) = Z_e / \varepsilon r$ — собственный потенциал частицы (ε — диэлектрическая проницаемость плазмы).

Первое равенство означает, что в термодинамическом равновесии свободная энергия F (независимые переменные — объем V и температура T) есть функция состояния, т. е. первое соотношение (1) представляет собой условие полного дифференциала для функции F. Второе соотношение выражает симметричность энергии электростатического взаимодействия по типу частиц.

Цель настоящей работы — выяснить возможности построения самосогласованного решения в недебаевском приближении, исходя из уравнения Пуассона —Больцмана.

Рассмотрим плотную низкотемпературную плазму, находящуюся в состоянии термодинамического равновесия. Пусть равенство кинетической и потенциальной энергий имеет место, когда частицы сблизятся на некоторое расстояние r_0, тогда

$$r_0 = e^2 Z^2 / 2\varepsilon KT \tag{2}$$

Следуя Бьерруму [3], разделим весь ансамбль на два класса:

1) свободные заряды; в этом случае относительное расстояние между частицами r всегда больше r_0;

2) связанные заряды; для данного класса $r < r_0$, и движение частиц является финитным.

Если β — вероятность образования связанного состояния, то концентрация свободных зарядов, очевидно, равна $(1 - \beta)n'$. Таким образом, величина r_0 будет некоторым критическим радиусом, с помощью которого различаются свободные и связанные заряды. Оказывается, что в выборе r_0 существует определенный произвол, заключающийся в том, что точное значение оказывается несущественным, и окончательный результат слабо изменяется [4] при замене r_0, скажем, на $r_0 / 2$ или $2r_0$.

Будем считать, что свободные частицы имеют эффективный радиус γ, выбранный вблизи r_0, поскольку, если они сближаются на расстояние, меньшее r_0, то перестают быть свободными.

Воспользуемся приближением Бьеррума, которое состоит в том, что пренебрегается действием электростатического поля связанных зарядов на остальные частицы. Но, в отличие от Бьеррума, применявшего к свободным зарядам теорию Дебая — Хюккеля, попытаемся построить для них точное решение уравнений Пуассона — Больцмана, которое запишем в следующем виде:

$$\Delta_r \Phi = -4\pi \frac{e}{\varepsilon} \sum_j n_j' Z_j (1 - \beta_j) \exp\left\{-\frac{eZ_j\Phi}{kT}\right\} \tag{3}$$

где n_j' — концентрация частиц сорта j.

Для простоты будем считать β известным параметром, хотя в действительности следует решать уравнение (3) вместе с соответствующим уравнением для β_j. В правой части (3) суммирование осуществляется по всем сортам частиц.

Граничные условия вводим обычным образом

$$\Phi(r) \to 0 \text{ при } r \to \infty, \quad \Phi_r' = eZ / \varepsilon r^2 \text{ при } r = \gamma \tag{4}$$

Предполагается выполнение условия электронейтральности:

$$\sum_j n_j' Z_j = 0 \tag{5}$$

Введем следующие обозначения:

$$(1 - \beta_j)\, n_j' = \frac{N}{V} n_j, \quad \varkappa^2 = \frac{4\pi N e^2}{\varepsilon KT} \sum_j \frac{n_j Z_j^2}{V}, \quad \begin{matrix} x = \varkappa\gamma \\ \rho = \varkappa r \end{matrix}$$

$$q_\nu = \left(\sum_j n_j Z_j^{\nu+1}\right) \Big/ \sum_j n_j Z_j^2, \qquad f = \rho^2 \sum_{j \geqslant 2}^{\infty} \frac{(-1)^{j-1}}{j!} \left(\frac{\varepsilon}{KT}\right)^{j-1} q_j \Phi^j \tag{6}$$

Тогда уравнение (3) запишется в виде

$$(\Delta_\rho - \rho^2)\, \Phi = f(\Phi) \tag{7}$$

Уравнение (7) сводится к интегральному введением функции Грина

$$\Phi(\rho) = \frac{\mu(\gamma)}{1 + x} \frac{x}{\rho} e^{x-\rho} + \int_x^\infty G(\theta, \rho)\, f\{\Phi(\theta)\}\, \theta^2 d\theta \qquad \left(\mu(\gamma) = \frac{eZ}{\varepsilon\gamma}\right) \tag{8}$$

Здесь G — функция Грина

$$G(\theta, \rho) = \begin{cases} -[e^{\theta-\rho} + e^{2x-(\theta+\rho)}(x-1)/(x+1)]/2\rho\theta, & \theta \leqslant \rho \\ -[e^{\rho-\theta} + e^{2x-(\theta+\rho)}(x-1)/(x+1)]/2\rho\theta, & \theta \geqslant \rho \end{cases} \tag{9}$$

Уравнение (8) будем решать методом, предложенным в работе [2]. Решение ищется в виде ряда, сходящегося к решению интегрального уравнения, если коэффициент $\alpha < 1$

$$\Phi(\rho, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \psi_k(\rho, x) \qquad \left(\alpha^k = \frac{e^{2k-1}Z^k}{(\varepsilon\gamma)^k(-KT)^{k-1}}\right) \tag{10}$$

Так как в выборе r_0 существует определенный произвол, то, полагая $\gamma = ae^2Z^2/\varepsilon r_0 KT$, где $a > 1$, получим $\alpha < 1$.

Представим $f(\Phi)$ в виде

$$f(\Phi) = \sum_{j\geqslant 2}^{\infty} \alpha^j f_j(\rho, x), \qquad f_k = \sum_{(m_1+m_2+\cdots+mk=k,\ k\geqslant 2)} \frac{q_k}{k!}\psi_{m_1} \ldots \psi_{m_k} \tag{11}$$

Подставляя (10) в интегральное уравнение (9), получаем интегральное представление для ψ_m, используя то обстоятельство, что $q_{2j} = 0$ для $j = 1, 2, \ldots$. Действительно, в большинстве случаев в интересующем нас интервале энергий ($\sim 1\ eV$) вторичной ионизации практически не происходит и условие электронейтральности содержит лишь $Z_j = \pm 1$, что и дает нам $q_{2j} = 0$. Решение уравнения (8) представим в виде

$$\psi_1 = \frac{x}{1+x}\frac{1}{\rho}\exp(x-\rho), \qquad \psi_n(\rho, x) = \int_x^{\infty} G(\theta, \rho) f_n(\theta, x)\,\theta^2 d\theta \quad (n > 1) \tag{12}$$

Выпишем первые члены для $f_n(\theta, x)$

$$f_2 = {}^1/_2 q_2 \psi_1^2, \qquad f_3 = q_2\psi_1\psi_2 + {}^1/_6 q_3 \psi_1^3 \tag{13}$$

Можно заметить, что в силу $q_{2j} = 0$ все $\psi_{2j} = 0$, $f_{2j} = 0$ ($j_2 = 1,2,\ldots$). Представление (12) позволяет последовательно получить все функции ψ_n.

Первый член ряда (11) представляет собой решение Бьеррума, которое переходит в дебаевское, если заменить γ на истинный размер частицы и положить $\beta = 0$.

Покажем, что точное решение не будет самосогласованным, хотя второе условие (1), как легко проверить, выполняется, причем никакой калибровкой заряда нельзя добиться выполнения первого условия (1).

Калибровку заряда проведем следующим способом:

$$Z_\alpha^* = Z_\alpha \lambda \tag{14}$$

где λ — переменная величина, меняющаяся от нуля до некоторого числа, выбранного так, чтобы обеспечивалась сходимость рядов, содержащих λ. Звездочкой будем отмечать величины, умноженные на λ.

Для простоты рассмотрим однозарядную, например, электронно-протонную плазму. Результат легко переносится на более сложные случаи. Первое условие (1) записывается в форме

$$Z_{(e)}\frac{\partial\Phi_{0(p)}(x^*, x^*)}{\partial\lambda} = Z_{(p)}\frac{\partial\Phi_{0(e)}(x^*, x^*)}{\partial\lambda}, \text{ или } \frac{\partial\Phi_{0(p)}}{\partial\lambda} = -\frac{\partial\Phi_{0(e)}}{\partial\lambda}$$

Скобки (p) и (e) означают принадлежность соответственно протонной и электронной компонентам. Потенциалы берутся на поверхности $r = \gamma$, причем величина γ считается фиксированной. Вспоминая, что собственный потенциал частицы на этой поверхности равен μ, имеем

$$\Phi_0 = \sum_{j=1}^{\infty} (\alpha_j^*)^j \psi_j (x^*, x^*) - \mu^*$$

Тогда

$$\frac{\partial \Phi_0}{\partial \lambda} = \sum_{j=1}^{\infty} (\alpha_j^*)^j \left[\frac{j}{\lambda} \psi_j + x \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \right] - \mu$$

Так как

$$\mu_{(e)} = -\mu_{(p)}, \qquad \alpha_{(p)}^* = -\alpha_{(e)}^*, \qquad x_{(p)} = x_{(e)}, \qquad \psi_{i(p)} = \psi_{i(e)}$$

то

$$\partial \Phi_0 / \partial \lambda = 0 \tag{15}$$

Легко показать, что в силу ограниченности ψ_j и $\partial \psi_j / \partial \lambda$ одним из решений уравнения (15) будет $\lambda = 0$. Это видно, если уравнение записать в форме

$$\mu \left(\frac{1}{\lambda x + 1} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{\infty} Q_j \lambda^i = 0 \qquad \left(Q_j = j (\alpha_{j+1})^j \psi_{j+1} + x (\alpha_j)^j \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \right) \tag{16}$$

Из (15) следует, что $\Phi(\lambda) = Cte$ при фиксировании всех переменных кроме λ. С другой стороны, при $\lambda = 0$ и $\Phi = 0$, следовательно

$$\Phi \equiv 0 \tag{17}$$

Любой другой корень уравнения (16) противоречит условию (17).

Таким образом, $\lambda = 1$ не может удовлетворять одновременно условиям (15) и (17), эквивалентным требованию самосогласованности поля. Точное решение уравнения (3) будет самосогласованным лишь для системы нейтральных частиц. Этот результат еще раз подтверждает ту точку зрения, что самосогласованность в плазме устанавливается лишь благодаря коррелятивным процессам и не может быть получена в решении уравнения Пуассона — Больцмана никакой калибровкой заряда. Напомним, что дебаевское решение, представляемое первым членом ряда, автоматически будет самосогласованным, так как $\partial(\psi_{1\beta} - \mu_\beta) / \partial z_\alpha$ содержит лишь комбинацию $Z_\alpha Z_\beta$, т. е. первое условие (1) удовлетворяется тождественно.

Для того чтобы использовать уравнение Пуассона — Больцмана для расчета потенциала плотной низкотемпературной плазмы, представляется возможным взять конечное число членов ряда (10), накладывая на них первое условие (1). Для определения $\lambda_{2\nu+1}$, это приводит к уравнениям

$$\frac{\partial \Phi_{(2\nu+1)}(x^*, x^*)}{\partial \lambda_{2\nu+1}} = 0 \quad \Phi_{(2\nu+1)}(x^*, x^*) = \sum_{k=1}^{2\nu+1} (\alpha^*)^{2k+1} \Phi_{(2k+1)}(x^*, x^*) \qquad (\nu = 1, 2, \ldots) \tag{18}$$

После этого решение, разумеется, перестает быть точным, но становится самосогласованным, так как оба условия (1) для любой конечной суммы членов ряда (10) будут удовлетворяться.

Напишем, например, уравнение для $\nu = 1$, что нам дает возможность просчитать четыре члена ряда (10), так как $\psi_4 \equiv 0$.

Для ψ_3 нетрудно получить

$$\psi_3 = -\frac{\lambda_3^2}{6} \frac{(x^*)^2}{(1 + x^*)^4} [1 - 4x^* E_1 (4x^*) \exp (4x^*)] \qquad (x^* = x\lambda_3^3) \tag{19}$$

Подставляя (19) в (18), получаем для определения λ_3 трансцендентное уравнение (20)

$$F_3(x^*) = 16\delta(x^*)\,[3(x^*)^3 + 2(x^*)^2 + 2x^*] - 12(x^*)^2 - 5(x^* + 1) = 0$$

где

$$\delta(x^*) = E_1(4x^*)\exp(4x^*)$$

Исследование $F_3(x^*)$ показывает, что кривая ведет себя следующим образом: при малых x^* функция F_3 отрицательная, при $x^* = x_0^* = 0.40$ она пересекает ось абсцисс, затем некоторое время находится в области положительных значений и, наконец, при $x^* \to \infty$ стремится к $-\infty$. При $x^* = x_0^*$ имеет место $F_3' > 0$, т. е. осуществляется устойчивое решение. Тогда условие $\alpha_3 < 1$ будет обеспечено если

$$n_e' < \frac{0.16\varepsilon^3}{8\pi(1-\beta)}\left(\frac{KT}{e^{16}}\right)^{1/3}$$

Значения $\lambda_3 = (x_0^* / x_0)^{1/3}$ приведены в таблице для различных T и n_e' [$см^{-3}$] при $\varepsilon = 1$ и 3.

ε	n_e'	10^{16}	$5\cdot10^{16}$	10^{17}	$5\cdot10^{17}$	10^{18}	$5\cdot10^{18}$	10^{19}
1	T=5 000°	3.48	2.66	2.38	1.81	1.62	1.24	1.10
	T=10 000°	4.92	3.76	3.36	3.43	2.29	1.76	1.56
	T=20 000°	6.97	5.33	4.75	3.63	3.23	2.47	2.20
3	T=5 000°	6.04	4.61	4.12	3.20	2.81	2·15	1.92
	T=10 000°	8.54	6.52	5.81	4.57	3.96	3·02	2.70
	T=20 000°	12.08	9.20	8.22	6.39	4.28	4·30	3.83

Введем обозначения

$$\Phi_k = \sum_{j=1}^{k} (\alpha_j^*)^j \psi_j, \qquad \varphi(x_0^*) = \frac{1}{\lambda_3^2}\psi_3(x_0^*) \tag{21}$$

Тогда

$$\Phi_4 = -\frac{e\varkappa}{\varepsilon}\left\{\frac{1}{1+x} + x^{-2/3}(x_0^*)^{-1/3}\varphi(x_0^*)\right\} \tag{22}$$

Анализируя Φ_4, видим, что при малых x^* относительная поправка к дебаевскому потенциалу уменьшается с ростом x^*, имеет минимум $\approx 0.3\%$ при $x^* = 2$, а затем снова начинает увеличиваться. Продолжая вычисления, можно получить Φ_6. При помощи выражения (12), используя ψ_3, вычисляем

$$\psi_5(x^*, x^*) = \frac{\lambda^4 (x^*)^5}{120(1+x^*)^6}\Big\{-\frac{1}{3}(x^*)^{-3} + (x^*)^{-2} + 14(x^*)^{-1} - 10(1+x^*)^{-1} -$$
$$- 24E_1(6x^*)\exp(6x^*) - \frac{80}{(1+x^*)}E_1(4x^*)\,x\,\times$$
$$\times \exp(4x^*) - 80\frac{1-x^*}{1+x^*}E_1^2(4x^*)\exp(8x^*) + 80\exp(6x^*)\,I(x^*)$$

Здесь

$$I(x^*) = \int_{x^*}^{\infty}\frac{e^{-2u}E_1(4u)}{u}\,du = E_1(4x^*)\left[E_1(2x^*) - \frac{1}{2}E_1(4x^*) - \ln 2\right] +$$
$$+ \exp(-4x^*)\sum_{j=1}^{\infty} A_j(4x^*)^j \left(A_j = \frac{1}{j!}\sum_{k=j+1}^{\infty}\frac{(-1)^{k-1}}{k^2}\left[1-\left(\frac{1}{2}\right)^k\right]\right)$$