

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 ($n'_e \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $KT \sim 1 \text{ eV}$) 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:

$$\frac{\partial \Phi_{0\alpha}}{\partial Z_\beta} - \frac{\partial \Phi_{0\beta}}{\partial z_\alpha} = 0, \quad \frac{\Phi_\alpha}{Z_\alpha} - \frac{\Phi_\beta}{Z_\beta} = 0 \quad (1)$$

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 $\mu(r) = Z_e / \epsilon r$ — 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 не-

которое расстояние r_0 , тогда

$$r_0 = e^2 Z^2 / 2\epsilon K T \quad (2)$$

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:

$$\Delta_r \Phi = -4\pi \frac{e}{\epsilon} \sum_j n_j' Z_j (1 - \beta_j) \exp \left\{ -\frac{e Z_j \Phi}{k T} \right\} \quad (3)$$

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

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

Предполагается выполнение условия электронейтральности:

$$\sum_j n_j' Z_j = 0 \quad (5)$$

Введем следующие обозначения:

$$(1 - \beta_j) n_j' = \frac{N_j}{V} n_j, \quad \kappa^2 = \frac{4\pi N e^2}{\epsilon K T} \sum_j \frac{n_j Z_j^2}{V}, \quad \begin{matrix} x = \kappa \gamma \\ \rho = \kappa r \end{matrix}$$

$$q_\nu = \left(\sum_j n_j Z_j^{\nu+1} \right) / \sum_j n_j Z_j^2, \quad f = \rho^2 \sum_{j \geq 2} \frac{(-1)^{j-1}}{j!} \left(\frac{e}{K T} \right)^{j-1} q_j \Phi^j \quad (6)$$

Тогда уравнение (3) запишется в виде

$$(\Delta_\rho - \rho^2) \Phi = f(\Phi) \quad (7)$$

Уравнение (7) сводится к интегральному введением функции Грина

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

Здесь G — функция Грина

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

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

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

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

Представим $f(\Phi)$ в виде

$$f(\Phi) = \sum_{j \geq 2} \alpha^j f_j(\rho, x), \quad f_k = \sum_{(m_1 + m_2 + \dots + m_k = k, k \geq 2} \frac{q_k}{k!} \psi_{m_1} \dots \psi_{m_k} \quad (11)$$

Подставляя (10) в интегральное уравнение (9), получаем интегральное представление для ψ_m , используя то обстоятельство, что $q_{2j} = 0$ для $j = 1, 2, \dots$. Действительно, в большинстве случаев в интересующем нас интервале энергий (~ 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

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

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

$$f_2 = \frac{1}{2} q_2 \psi_1^2, \quad f_3 = q_2 \psi_1 \psi_2 + \frac{1}{6} q_3 \psi_1^3 \quad (13)$$

Можно заметить, что в силу $q_{2j} = 0$ все $\psi_{2j} = 0$, $f_{2j} = 0$ ($j = 1, 2, \dots$). 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:

$$Z_x^* = Z_\alpha \lambda \quad (14)$$

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

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

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

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

то

$$\partial \Phi_0 / \partial \lambda = 0 \quad (15)$$

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

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

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

$$\Phi \equiv 0 \quad (17)$$

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

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

($\nu = 1, 2, \dots$)

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

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

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 $x^* \rightarrow \infty$ стремится к $-\infty$. При $x^* = x_3^*$ имеет место $F_3' > 0$, т. е. осуществляется устойчивое решение. Тогда условие $\alpha_3 < 1$ будет обеспечено если

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

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

ϵ	n_e'	10^{16}	$5 \cdot 10^{16}$	10^{17}	$5 \cdot 10^{17}$	10^{18}	$5 \cdot 10^{18}$	10^{19}
1	$T=5\ 000^\circ$	3.48	2.66	2.38	1.81	1.62	1.24	1.10
	$T=10\ 000^\circ$	4.92	3.76	3.36	3.43	2.29	1.76	1.56
	$T=20\ 000^\circ$	6.97	5.33	4.75	3.63	3.23	2.47	2.20
3	$T=5\ 000^\circ$	6.04	4.61	4.12	3.20	2.81	2.15	1.92
	$T=10\ 000^\circ$	8.54	6.52	5.81	4.57	3.96	3.02	2.70
	$T=20\ 000^\circ$	12.08	9.20	8.22	6.39	4.28	4.30	3.83

Введем обозначения

$$\Phi_k = \sum_{j=1}^k (\alpha_j^*)^j \psi_j, \quad \varphi(x_0^*) = \frac{1}{\lambda_3^3} \psi_3(x_0^*) \quad (21)$$

Тогда

$$\Phi_4 = -\frac{\epsilon\kappa}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{1+x} + x^{-3/2} (x_0^*)^{-1/2} \varphi(x_0^*) \right\} \quad (22)$$

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

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

Здесь

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

Заметим, что ряд A_j быстро сходится.

Аналогичным путем можно получить уравнение для определения

$$x^* = \lambda_3^5 x$$

однако более сложное, чем (20). Трудности при³ получении последующих членов ряда быстро нарастают.

В заключение сделаем несколько замечаний. Решение вида (22) будет самосогласованным приближением к точному несамосогласованному решению уравнения Пуассона — Больцмана. Результат — промежуточный между решением Дебая и точным решением (9). Таким образом, отказываемся от точного решения для того, чтобы удовлетворить важнейший физический принцип самосогласованности потенциала, и исправляем решение в области, где дебаевское несправедливо. Как уже указывалось выше, более корректным подходом к изучению потенциала плотной низкотемпературной плазмы будет рассмотрение цепочек Н. Н. Боголюбова для корреляционных функций. Так, например, В. В. Толмачевым и С. В. Тябликовым [5] получены важные результаты, существенно улучшающие дебаевское решение, но в предположении $e^2 / kT\epsilon \ll 1$. Нам представляется, что дальнейшее изучение плотных низкотемпературных плазм должно идти по подобному пути и в этом случае представляет интерес сравнение точного «коррелятивного» подхода с бескоррелятивным, исправленным требованием самосогласованности потенциала.

Авторы благодарят Е. С. Кузнецова за интерес к работе и ценные замечания, а также М. В. Масленникова и Н. И. Кузнецову за обсуждение.

Поступила 13 VI 1963

ЛИТЕРАТУРА

1. Gronwall, La Mer und Sandved. Über den Einfluß der sogenannten höheren Glieder in der Debye-Hückelshen Theorie der Lösungen starker Elektrolyte. Phys. Zs., 1928, t. 29.
2. G u g g e n h e i m. The specific thermodynamic properties of aqueous solutions of strong electrolytes. Philos. Mag., 1935, 19.
3. Ф а у л е р Р. и Г у г г е и г е й м Э. Статистическая физика и термодинамика, гл. 9. ИЛ, 1949.
4. Fuoss. Distribution of ions in electrolytic solutions. Trans. Faraday Soc., 1934, vol. 30.
5. Тябликов С. В. и Толмачев В. В. Функция распределения для классического электронного газа. Докл. АН СССР, 1957, т. 114, № 6.