Приближение ближайшего соседа и функции распределения “свободных” электронов по расстояниям и скоростям в атомарной плазме

А. Л. Хомкин и А. С. Шумихин

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: shum_ac@mail.ru

Статья поступила в редакцию 26 сентября 2019 г.

Аннотация. В работе рассмотрены два весьма важных для физики низкотемпературной плазмы эффекта: определяющая роль взаимодействия электрона с ближайшим к нему ионом, а также важная роль ограничения фазового пространства “свободных” электронов, связанная с положительной энергией их относительного движения в поле ближайшего иона. Выполнены расчеты средней энергии электрона и функций распределения ближайшего электрона по кинетической энергии и расстояниям в приближении ближайшего соседа с учетом фазовых эффектов, характерных для систем с реакциями. Еще раз подтверждена высказанная ранее идея о немаксвелловости функции распределения “свободных” электронов по скоростям. Выполнены оценки влияния этого эффекта на скорость трехчастичной рекомбинации электронов в плазме и проведено сравнение с данными молекулярно-динамических расчетов. https://doi.org/10.33849/2019201

1. ВВЕДЕНИЕ

Приближение ближайшего соседа (ПБС) давно и успешно используется в физике плазмы, особенно применительно к вычислению функции распределения микрополя в статистической теории уширения спектральных линий [1, 2], а также в ряде других задач [3]. В этом приближении взаимодействие частицы с окружением заменяется ее взаимодействием с ближайшим соседом, находящимся с определенной вероятностью $F(R)$ на расстоянии R от данной точки, где, например, может находится ион. Эта вероятность определяется как пуассоновская вероятность отсутствия частиц с плотностью n в полости радиуса R. Для плотности вероятности имеем [1]:

$$F(R) = 4\pi nR^2 \exp(-\frac{4}{3}\pi nR^3). \tag{1}$$

Свое развитие это приближение получило в работах [4, 5], где были получены регулярные соотношения для $F(R)$, учитывающие плотностные эффекты, и регулярные соотношения для функции распределения микропотенциала (ФРМП) и плотности состояний (ПС) для атомарной плазмы, учитывающие влияние других частиц. В работах [6–8] ПБС использовано для расчёта вероятности существования (реализации) связанного состояния с энергией связи E_k в атоме водорода и других атомов $\omega(k)$.

$$\omega(k) = \exp(-\frac{4}{3}\pi nR_k^3), \tag{2}$$

где R_k — радиус орбиты электрона, находящегося в связанном состоянии с энергией связи E_k.

С использованием (2) статистическая сумма атома Σ_a сходится и легко рассчитывается [8]:

$$\Sigma_a = \sum_{k=1}^{\infty} 2k^2 \exp(\frac{Ry}{k^2})\omega(k), \tag{3}$$

где Ry — потенциал ионизации атома водорода, а для радиуса орбиты связанного электрона с главным квантовым числом k используется соотношение:

$$R_k = \frac{e^2}{E_k} = 2a_0k^2. \tag{4}$$

Недавно в [9] ПБС было успешно использовано для описания результатов численных экспериментов с прямым измерением ФРМП и ПС некоторых модельных кулоновских систем. В серии работ, посвященных свойствам плазменного флюида паров металлов, состояний с температурой и плотностью выше критической, ПБС предложено использовать для описания энергии межзарядового взаимодействия вместо классической дебаевской энергии. Сравнительный анализ ПБС и дебаевского приближения при расчете термодинамических функций неидеальной плазмы выполнен в [10]. В работе [11] ПБС использовано для оценки влияния эффектов неидеальности на транспортные коэффициенты плотной плазмы. Учтены эффекты уменьшения фазового пространства свободных зарядов.

В настоящей работе рассмотрен ряд важных, на взгляд авторов, примеров использования ПБС в термодинамике и кинетике низкотемпературной плазмы. Выполнен расчет средней потенциальной энергии взаимодействия свободного электрона с плазмой в приближении ближайшего соседа без использования представления о коллективной экранировке. Получена равновесная функция распределения “свободных” электронов по скоростям и расстояниям. Функция распределения по скоростям оказывается не максвелловской. Функция распределения по расстояниям в ПБС и с учетом уменьшения фазового пространства “свободных” электронов конечна при всех расстояниях до ближайшего иона. Получены оценки коэффициента тройной рекомбинации с учетом немаксвелловости равновесной функции распределения электронов по скоростям и выполнено сравнение с численным экспериментом [12].

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Рассмотрим неидеальную смесь атомов N_a, ионов N_i и электронов N_e. Система занимает объем V и находится при температуре $k_{\text{B}}T = 1/\beta$. Плотности частиц определяются как $n_l = N_l/V$ (l=a, i, e). Начнем наше рассмотрение с функции распределения микропотенциала (ФРМП) $\rho(u)$, создаваемого ближайшей к началу координат частицей из ансамбля N случайно расположенных:

$$\rho(u) = \frac{1}{V^N}\int d\Gamma_N \delta(u - \sum_{i=1}^{N} W(i)), \qquad (5)$$

где $W(i)$ — потенциал, создаваемый одной частицей; $d\Gamma_N = d\boldsymbol{R}_1 \dots d\boldsymbol{R}_N$.

Для любой конфигурации всегда можно указать (и единственным образом) частицу, ближайшую к началу координат. Пусть это будет частица под номером 1. Проинтегрируем по области, где $R_i \geq R_1$, затем учтем конфигурации, когда ближайшей к началу координат будет частица 2 и повторим процедуру и т.д. Считая все интегралы одинаковыми, получим:

$$\frac{1}{V^N}\int d\Gamma_N \dots \equiv \frac{1}{V^N}\sum_{i=1}^{N}\int dR_i \int d\Gamma_{N-1\,R_j>R_i} \dots$$
$$\equiv \frac{N}{V}\frac{1}{V^{N-1}}\int dR_1 \int d\Gamma_{N-1\,R_j>R_1} \dots . \qquad (6)$$

Для второго интеграла имеем

$$\frac{1}{V^{N-1}}\int d\Gamma_{N-1\,R_j>R_1} \dots = \frac{1}{V^{N-1}}\big(V - \frac{4}{3}\pi R_1^3\big)^{N-1}$$
$$= \Big(1 - \frac{4}{3}\pi n R_1^3 \frac{1}{N-1}\Big)^{N-1}. \qquad (7)$$

В пределе $N \to \infty$ для $\rho(u)$ получим:

$$\rho(u) = 4\pi n \int_0^\infty dR R^2 \delta(u - W(R)) \exp\big(-\frac{4}{3}\pi n R^3\big). \qquad (8)$$

Функция $\exp(-4\pi/3nR^3)$ носит название вероятности ближайшего соседа и является пуассоновской вероятностью отсутствия частиц в сфере радиуса R, а $4\pi nR^2 \exp(-4\pi/3nR^3)$ — плотность вероятности ближайшего соседа. Последняя нормирована на 1, как и функция $\rho(u)$, которая так же нормирована на единицу. Заметим, что (8) не совпадает с парным приближением, для которого $\rho(u) = V^{-1}\int_0^\infty d\boldsymbol{R}\delta(u - W(R))$ и она ненормируемая. Приближение ближайшего соседа в определенном смысле является многочастичным, поскольку описывает взаимодействие пробной частицы со всеми частицами ансамбля.

3. СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ ЗАРЯДА В ПРИБЛИЖЕНИИ БЛИЖАЙШЕГО СОСЕДА

Зная вероятность того, что частица является ближайшей можно вычислить среднюю энергию заряда в плазме. Поместим в начало координат ион и вычислим среднюю энергию его взаимодействия с ближайшим электроном E_{NNA}:

$$E_{\text{NNA}} = < \frac{e^2}{R} > . \qquad (9)$$

Процедура усреднения должна учитывать два обстоятельства: то, что электрон является ближайшей к пробному иону частицей, а также тот факт (обычно игнорируемый), что электрон является частицей "свободной". Последнее означает, что энергия относительного движения электрона в поле иона положительна. Для учета этого обстоятельства необходимо использовать импульс движения электрона $\boldsymbol{p}$, поскольку фазовое пространство движения "свободного" электрона Ω определяется соотношением:

$$\Omega : \Big(\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{R}\Big) \geq 0. \qquad (10)$$

В результате для процедуры усреднения (9) по фазовому пространству Ω имеем:

$$E_{\text{NNA}} = A\int d\boldsymbol{p}d\boldsymbol{R}\Big(\frac{e^2}{R}\Big)\exp\Big(-\beta\Big(\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{R}\Big)\Big)$$
$$\times \exp\Big(-\frac{4}{3}\pi(n_{\text{e}} + n_{\text{i}})R^3\Big). \qquad (11)$$

Константа A определяется соотношением:

$$1 = A\int d\boldsymbol{p}d\boldsymbol{R}\exp\Big(-\beta\Big(\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{R}\Big)\Big)\exp\Big(-\frac{4}{3}\pi(n_{\text{e}} + n_{\text{i}})R^3\Big). \qquad (12)$$

Вводя безразмерные переменные $x = (\beta p^2)/(2m)$ и $y = (\beta e^2)/R$ получим для фазового пространства соотношение $(x - y) > 0$, а для интеграла (11):

$$< \frac{\beta e^2}{R} > = A\Gamma^2 \int_0^\infty \frac{dy}{y^4}\Big(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_y^\infty \sqrt{x}\mathrm{e}^{-x}dx\Big) y\mathrm{e}^y \exp\Big(-\frac{\Gamma^2}{3y^3}\Big). \qquad (13)$$

Константа A определяется из условия нормировки и мы, тем самым, можем не следить за многочисленными множителями, которые появляются в регулярных подходах.

$$1 = A\Gamma^2 \int_0^\infty \frac{dy}{y^4}\Big(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_y^\infty \sqrt{x}\mathrm{e}^{-x}dx\Big)\mathrm{e}^y \exp\Big(-\frac{\Gamma^2}{3y^3}\Big). \qquad (14)$$

При записи (13) мы ввели дебаевский параметр неидеальности Γ. Определим для полноты также и маделунговский параметр неидеальности γ:

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{R_{\text{D}}} = \beta e^2 \sqrt{4\pi\beta e^2(n_{\text{e}} + n_{\text{i}})}, \qquad (15)$$

$$\gamma = \frac{\beta e^2}{R_{\text{i}}} = \beta e^2 \Big(\frac{4\pi n_{\text{i}}}{3}\Big)^{1/3}. \qquad (16)$$

Внутренний интеграл в (13) по x дает неполную Гамма-функцию, которая полностью компенсирует расходимость от больцмановской экспоненты при больших y (малые R). Приближение ближайшего соседа обеспечивает сходимость (13) при малых y (большие R). Приведенные выкладки показывают, что использование ПБС с учетом ограничения фазового пространства самодостаточная процедура, не требующая использования теории Дебая–Хюккеля и различных процедур обрезания кулоновского потенциала на малых расстояниях. Для средней энергии в ПБС естественным скейлинговым параметром будет энергия электрона на границе

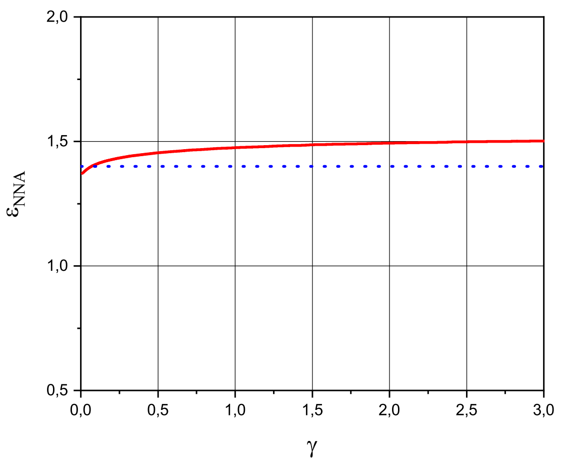

Рисунок 1. Безразмерная средняя энергия взаимодействии иона с ближайшим к нему электроном $\epsilon_{\rm NNA}$ в зависимости от параметра γ.

ячейки Вигнера-Зейтца — $e^2/R_{\rm i}$, где $R_{\rm i}$ — радиус ионной ячейки Вигнера–Зейтца ($4\pi n_{\rm i} R_{\rm i}^3/3 = 1$). В результате мы рассмотрим безразмерную величину:

$$\epsilon_{\rm NNA} = \frac{< e^2/R >}{e^2/R_{\rm i}}. \tag{17}$$

На рисунке 1 нанесена зависимость $\epsilon_{\rm NNA}$ от маделунговского параметра неидеальности $\gamma = (\beta e^2)/R_{\rm i}$ (сплошная красная кривая). Пунктирная прямая соответствует величине $\epsilon_{\rm NNA} = 1.4$, что можно рекомендовать для экспресс-расчетов.

Полученный численный коэффициент означает, что “свободный” и ближайший к иону электрон находится определенно внутри ячейки Вигнера–Зейтца, образуя своего рода диполь, взаимодействие которых между собой значительно слабее исходного кулоновского. Принципиальным обстоятельством при расчете состава и термодинамических функций неидеальной плазмы, разделившем исследователей на две группы, является существование или отсутствие в предлагаемых физических моделях плазменного фазового перехода. Ответ оказывается достаточно прост: к плазменному фазовому переходу приводят модели, использующие дебаевское приближение для расчета средней энергии взаимодействия заряда с плазмой. ПБС с тем или другим численным коэффициентом [10] к существованию плазменного фазового перехода не приводит.

4. ПОПРАВКА К КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ “СВОБОДНОГО” ЭЛЕКТРОНА В ПЛАЗМЕ

В настоящем разделе мы хотим обратить внимание на практически забытую серию работ Таймера с коллегами, посвященную исследованию роли фазовых эффектов при расчете различных свойств низкотемпературной плазмы [13, 14]. К сожалению, все усилия авторов были в дальнейшем направлены на модификацию дебаевского результата с учетом фазовых эффектов, под которыми мы подразумеваем влияние ограничения фазового пространства “свободных” частиц, определяемого неравенством (10). Принципиальных результатов, которые вошли бы в создаваемые потом химические модели, Таймер с сотрудниками не получили, но, тем не менее, они впервые обратили внимание на необычные свойства ансамбля “свободных” частиц. Среди важнейших с нашей точки зрения результатов необходимо отметить найденную ими поправку к кинетической энергии “свободных” электронов, а также вывод о немаксвелловости функции распределения “свободных” электронов по скоростям. Кстати, к такому же результату пришли авторы [15], применив метод канонического преобразования к кулоновской системе.

Мы специально обращаем внимание на то, что обсуждаемые эффекты относятся к ансамблю “свободных” электронов, ансамблю необычному тем обстоятельством, что фазовое пространство движения “свободных” электронов ограничено в соответствии с (10).

Повторим выкладки [13] для расчета поправки к кинетической энергии “свободного” электрона. Рассмотрим, следуя [13], плазму высокотемпературную $k_{\rm B}T \gg Ry$. Полное число ядер $N = N_{\rm a} + N_{\rm e}$. Таймер и др. обратили внимание на то, что даже в плазме высокотемпературной, где больцмановская экспонента обращается в единицу, имеются атомы, доля которых определяется статистической суммой $\Sigma_0 = \sum_1^{k*} k^2 = (k*)^3/3$. Для максимального квантового числа авторы использовали вполне разумное и широко используемое в дальнейшем соотношение $a_0(k*)^2 = R_{\rm i}$. Запишем, следуя [13], соотношение для полной кинетической энергии плазмы, которая складывается из кинетических энергий “свободных” $N_{\rm e}$ и связанных $N_{\rm a}$ электронов:

$$N\frac{3}{2}k_{\rm B}T = N_{\rm e}\big(\frac{3}{2}k_{\rm B}T + f_1\big) + N_{\rm a}E_{\rm a,kin}, \tag{18}$$

где f_1 — искомая поправка к кинетической энергии “свободных” электронов.

Используя цепочку неравенств $E_{\rm a,kin} \sim Ry \ll k_{\rm B}T$ для поправки к кинетической энергии, получаем:

$$f_1 = \frac{N_{\rm a}}{N_{\rm e}}k_{\rm B}T = \frac{\sqrt{3}\pi e^2}{R_{\rm D}}. \tag{19}$$

Мы использовали найденное в [13] соотношение:

$$\frac{N_{\rm a}}{N_{\rm e}} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\pi(\beta e^2)^{3/2}. \tag{20}$$

Поправка к кинетической энергии оказывается порядка дебаевской энергии и, участвуя в термодинамических расчетах с положительным знаком, практически обнуляет дебаевскую поправку. Практический учет этой поправки приводит к своего рода идеально-газовому поведению “неидеальной” плазмы. Заметим, что поправка (19) лишь буквенно совпадает с дебаевской энергией, но к теории Дебая–Хюккеля отношения не имеет. В [16], при развитии концепции “Базовых химических моделей”, этот результат был получен в большом каноническом ансамбле для плазмы низкотемпературной и совершенно иным способом. Учет рассмотренного результата группы Таймера 1969 года в термодинамических расчётах мог бы изменить вывод [17] о возможном существовании плазменного фазового перехода.

5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ "СВОБОДНЫХ" ЭЛЕКТРОНОВ ПО СКОРОСТЯМ

В классической статистической физике функция распределения частиц по скоростям всегда максвелловская, причем при любой плотности [18]. Это обусловлено тем, что интегрирование по импульсам и координатам в выражении для статистической суммы разделяются. Интегрирование по координатам больцмановской экспоненты приводит к появлению конфигурационного интеграла, а оставшаяся часть разбивается на произведение максвелловских функций распределения. Авторы [14] и [19] обратили внимание на то, что в случае образования в атомарном газе связанных состояний (атомов или молекул) полное фазовое пространство относительного движения двух частиц также должно быть разделено на две части. Первая соответствует отрицательным энергиям относительного движения (атомарная и молекулярная компоненты), а вторая — положительным ("свободные" электроны и "свободные" атомы). Для атомарно-молекулярного газа, в котором образование молекул можно в принципе описать в рамках классической статистики, функция распределения по скоростям остается максвелловской для всех частиц, как связанных, так и "свободных". Вполне разумным представляется предположение, что для "свободных" частиц распределение по скоростям (кинетическим энергиям) может оказаться отличающимся от максвелловского, что и было получено в [18].

Для атомарной плазмы, где одновременно присутствуют атомы и свободные электроны, предположение о немаксвелловости функции распределения "свободных" электронов по скоростям впервые сделано в [14]. Исследование этого вопроса представляется важным, поскольку многие кинетические характеристики частично ионизованной плазмы, такие как проводимость, коэффициент тройной рекомбинации и т.д., определяются путем усреднения по функции распределения "свободных" электронов по скоростям. В дальнейшем это предположение было подтверждено в предварительных численных экспериментах [20]. Следуя работе [14], проиллюстрируем вышесказанное на примере атомарной плазмы, в которой происходит образование связанных состояний (атомов) и есть "свободные" частицы (электроны и ионы). Считая ионы массивными частицами, рассмотрим функцию распределения электронов по кинетическим энергиям. Используя безразмерные переменные, введенные ранее (12) для функции распределения $f(x,\Gamma)$ получим:

$$f(x,\Gamma) = A(\Gamma)\sqrt{x}\mathrm{e}^{-x}H(x,\Gamma). \tag{21}$$

Фазовые эффекты $(x-y>0)$ и эффекты ПБС учитываются функцией:

$$H(x,\Gamma) = \Gamma^2\int_0^x \frac{\mathrm{e}^y}{y^4}\exp\Big(-\frac{\Gamma^2}{y^3}\Big)dy. \tag{22}$$

Нормировочная константа $A(\Gamma)$ определяется из условия нормировки:

$$\int_0^\infty f(x,\Gamma)dx = 1. \tag{23}$$

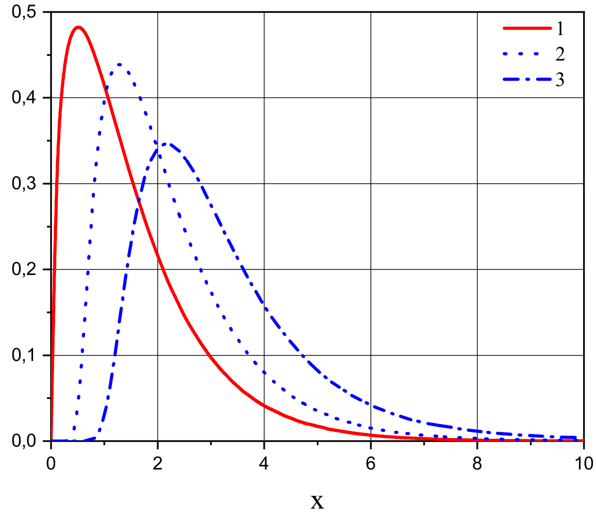

Рисунок 2. Функция распределения "свободных" электронов в зависимости от безразмерной кинетической энергии x: 1 — распределение Максвелла; 2 — расчет по формуле (21), $\Gamma = 1$; 3 — расчет по формуле (21), $\Gamma = 3$.

Максвелловское распределение в безразмерных переменных имеет вид:

$$f_{\mathrm{M}}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{x}\mathrm{e}^{-x}. \tag{24}$$

На рисунке 2 представлены функции распределения электронов по кинетической энергии, рассчитанные по формулам (21) и (24) для параметров неидеальности $\Gamma = 1, 3$. Видно, что эффект немаксвелловости проявляет себя достаточно заметно, особенно при больших кинетических энергиях. Хорошо видно смещение максимума распределения в сторону больших кинетических энергий. Происходит своего рода перегрев "свободных" электронов. Очевидно, что учет этого эффекта может приводить к значительному изменению различных кинетических коэффициентов, при расчете которых необходимо выполнять усреднение по скоростям свободных частиц.

В последнее время появились работы [12, 21–23], в которых методом молекулярной динамики исследуется релаксация модельных кулоновских систем и выполнены расчеты коэффициента рекомбинации в неидеальной плазме. Работы [21] и [23] отличаются процедурами расчета. Так в [21] измеряется поток в пространстве энергий связанных состояний, а в [23] — нарастание числа связанных состояний, которые определяются по числу оборотов электрона вокруг иона.

Нами выполнена оценка роли немаксвелловости на коэффициент рекомбинации. В соответствии с теорией Томсона средняя частота рекомбинации пропорциональна скорости налетающего электрона $(\sim\sqrt{p^2/(2m)})$, резерфордовскому сечению рассеяния $(\sim 1/(p^2/(2m))^2)$ и кубу длины Ландау $(\sim 1/(p^2/(2m))^3)$. Это приводит к известной зависимости коэффициента тройной рекомбинации от кинетической энергии налетающего электрона $(\sim (p^2/(2m))^{-9/2})$.

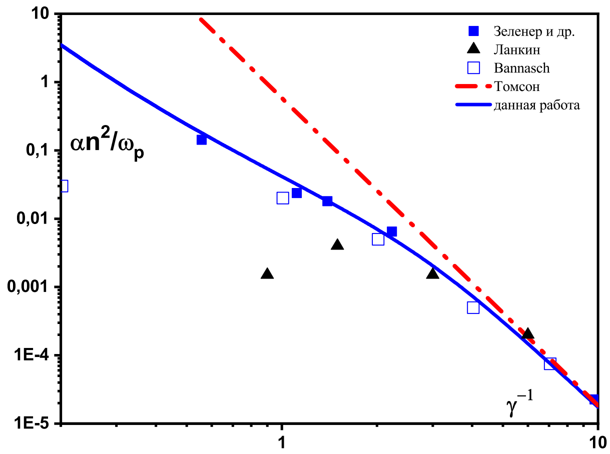

Рисунок 3. Зависимость безразмерного коэффициента рекомбинации от параметра неидеальности γ. Данные численного моделирования: сплошные квадраты —[21], открытые квадраты — [22], сплошные треугольники — [23]. Теория: штрихпунктирная кривая — Томсон, формула (26); сплошная кривая — данная работа, расчет с учетом корректирующего фактора (25)

.

С использованием найденной нами функции распределения по кинетическим энергиям "свободных" электронов мы рассчитали корректирующий фактор:

$$K(\gamma) = \frac{< \left(\frac{p^2}{2m}\right)^{9/2} >_{\text{Max}}}{< \left(\frac{p^2}{2m}\right)^{9/2} >_{\text{NonMax}}}. \qquad (25)$$

В числителе усреднение выполняется с функцией распределения Максвелла (24), а в знаменателе — с (21). Используя для коэффициента рекомбинации по Томсону α_{T} выражение:

$$\alpha_{\text{T}} = 2.07 \frac{e^{10}}{\sqrt{m} T^{9/2}}, \qquad (26)$$

можно получить оценку эффекта немаксвелловости при расчете $\alpha_{\text{NM}} = \alpha_{\text{T}} K(\gamma)$.

На рисунке 3 представлены зависимости безразмерных коэффициентов рекомбинации (α_{T} и α_{NM}) в единицах ω_{p}/n^2 от параметра неидеальности γ^{-1}, а также данные численного моделирования [12, 21–23].

Значительно ранее в [24] при рассмотрении процесса рекомбинации в сильно неидеальной плазме было замечено, что средняя кинетическая энергия "свободного" электрона будет близка к кинетической энергии движения электрона по силовой траектории в поле ближайшего иона $\sim e^2/R_{\text{i}}$. Использование аналогичного предположения в [21] привело к неплохому согласию с данными численных экспериментов. Заметим, что при получении своего результата авторы [21, 24] не связывали его с эффектом немаксвелловости.

6. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ "СВОБОДНЫХ" ЭЛЕКТРОНОВ ПО РАССТОЯНИЯМ

В этом разделе рассмотрим в ПБС функцию распределения "свободных" электронов по расстояниям до ближайшего иона с учетом фазовых эффектов. Фактически эта функция распределения уже была использована нами интегрально при расчете средней энергии "свободного" электрона (11):

$$f(y,\Gamma) = A(\Gamma)\frac{\Gamma^2}{y^4}\Big(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_y^\infty \sqrt{x}\mathrm{e}^{-x}dx\Big)\mathrm{e}^y \exp\Big(-\frac{\Gamma^2}{3y^3}\Big), \qquad (27)$$

где константа $A(\Gamma)$ определяется из условия нормировки $\int_0^\infty dy f(y,\Gamma) = 1$.

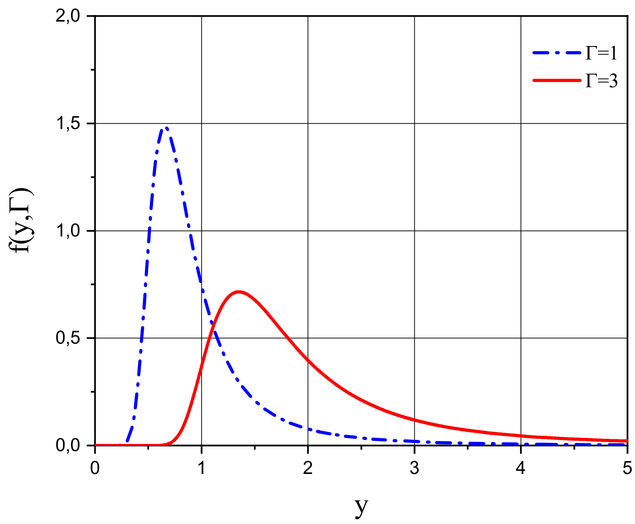

Рисунок 4. Функция распределения ближайших "свободных" электронов от иона в зависимости от безразмерного расстояния y для параметра неидеальности $\Gamma = 1$ (штрихпунктирная кривая) и параметра неидеальности $\Gamma = 3$ (сплошная кривая).

В отличие от парного приближения, найденная нами $f(y,\Gamma)$ является конечной при всех расстояниях и приводит к конечной средней энергии заряда (13) в плазме. На рисунке 4 представлены соответствующие расчеты для двух значений параметра Γ.

Функция распределения (27) является конечной при всех расстояниях и является именно функцией распределения, поскольку она нормируемая, в отличие от парной. Хорошо видно смещение максимума распределения в сторону больших y (малые R).

Рисунок 5 показывает положение максимума функции распределения по расстояниям в единицах радиуса Вигнера–Зейтца в зависимости от параметра неидеальности. Вновь видно, что ближайший электрон находится ненамного, но все же внутри ячейки Вигнера–Зейтца, образуя своего рода диполь, что несколько ослабляет совокупное взаимодействие "свободных" электронов и ионов. Некоторое отличие результатов для средней энергии (13) и для обратного среднего расстояния связано с разницей интегралов $\int_0^\infty y f(y,\Gamma)dy$ и $\int_0^\infty y^{-1} f(y,\Gamma)dy$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнены расчеты средней энергии и функций распределения электрона по кинетической

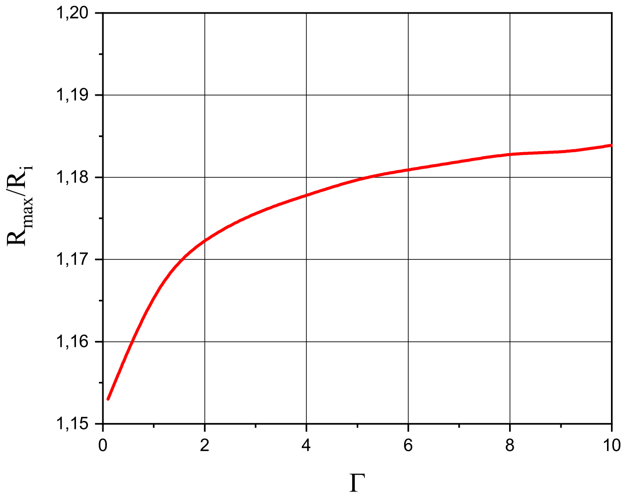

Рисунок 5. Зависимость безразмерной координаты максимума функции распределения $R_{\max}/R_{\rm i}$ ближайших электронов от параметра неидеальности Γ.

энергии и расстояниям в приближении ближайшего соседа с учетом фазовых эффектов, характерных для систем с реакциями. Подтверждена высказанная в [14] идея о немаксвелловости функции распределения "свободных" электронов по скоростям. Выполнены оценки влияния этого эффекта на скорость трехчастичной рекомбинации электронов в плазме и проведено сравнение с данными молекулярно-динамических расчетов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарят участников семинара Теоретического отдела им. Л. М. Бибермана ОИВТ РАН за активное и конструктивное обсуждение работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чандрасекар Р 1947 *Стохастические проблемы в физике и астрономии* (Москва: Изд-во иностр. лит.)
2. Собельман И И 1963 *Введение в теорию атомных спектров* (Москва: Физматлит)
3. Кудрин Л П 1974 *Статистическая физика плазмы* (Москва: Атомиздат)
4. Воробьев В С и Хомкин А Л 1976 *ТМФ* **26** 364
5. Воробьев В С и Хомкин А Л 1977 *Физика плазмы* **3** 885
6. Dappen W, Mihalas D, Hummer D G and Mihalas B W 1988 *Astrophys. J.* **332** 261
7. Hummer D G and Mihalas D 1988 *Astrophys. J.* **331** 794
8. Potekhin A Y 1996 *Phys. Plasmas* **3** 4156
9. Хомкин А Л и Шумихин А С 2016 *ТВТ* **54** 851
10. Хомкин А Л и Шумихин А С 2019 *Вестник ОИВТ РАН* **2** 19
11. Bobrov A A, Vorob'ev V S and Zelener B V 2018 *Phys. Plasmas* **25** 033513
12. Бобров А А, Зеленер Б Б, Зеленер Б В и Хихлуха Д Р 2013 *ТВТ* **51** 685
13. Theimer O and Wright T 1969 *Phys. Rev.* **180** 308–14
14. Theimer O and Deering W 1964 *Phys. Rev.* **134** A287–95
15. Воробьев В С и Хомкин А Л 1972 *ТВТ* **10** 939
16. Хомкин А Л, Воробьев В С, Муленко И А и Олейникова Е Н 2001 *Физика плазмы* **27** 369
17. Норман Г Э и Старостин А Н 1970 *ТВТ* **8** 413–38
18. Ландау Л Д и Лифшиц Е М 1976 *Статистическая физика* (Москва: Наука)
19. Хилл Т 1960 *Статистическая механика* (Москва: Изд-во иностр. лит.)
20. Maiorov S A and Khomkin A L 2019 *Phys. Sciences and Technology* **6** 57–67
21. Бобров А А, Бронин С Я, Зеленер Б Б, Зеленер Б В, Маныкин Э А и Хихлуха Д Р 2011 *ЖЭТФ* **139** 822–28
22. Bannasch G and Pohl T 2011 *Phys. Rev.* A **84** 052710
23. Lankin A V and Norman G E 2009 *J. Phys.* A **42** 214032
24. Биберман Л М, Воробьев В С и Якубов И Т 1987 *ДАН* **296** 577