

Проводимость газов и плазмы от Спитцера до Займана — для пользователей

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 7 июля 2021 г.

Аннотация. Выполнен критический анализ существующих соотношений, используемых для расчета проводимости газоплазменных сред. Предложена методика расчета электронных переносных коэффициентов, как говорят, “для пользователей” в продолжение начатого нами аналогичного подхода для расчета уравнения состояния и состава атомарной плазмы. Рекомендуемые соотношения охватывают достаточно широкий диапазон газоплазменных состояний, а их использование доступно молодым ученым и аспирантам. Надежность предлагаемых соотношений обусловлена многолетним опытом работы авторов в этой области, особенно применительно к плотным парам металлов и инертных газов. <https://doi.org/10.33849/2021101>

1. ВВЕДЕНИЕ

Для расчета электронных коэффициентов переноса газоплазменных смесей используется довольно много формул и приближений. Упомянем формулу Спитцера [1], τ -приближение [2], формулу Фроста, “аддитивную формулу” [3], приближение Лоренца–Блоха [4] и формулу Займана [5]. Особенно богат выбор выражений для расчета “кулоновского логарифма”. При численном моделировании используются формулы, основанные на теории линейного отклика и не требующие решения кинетического уравнения Больцмана. Такое многообразие подходов затрудняет проведение экспресс-оценок при разработке новых моделей, при планировании эксперимента и анализе полученных экспериментальных данных, тем более что многие методики и полученные результаты являются “авторскими”, представлены в виде таблиц и графиков, и без участия авторов их трудно повторить.

Целью настоящей работы является критический анализ существующих соотношений и создание методики расчета электронных переносных коэффициентов, как говорят, “для пользователей” в продолжение начатого в [6] аналогичного подхода для расчета уравнения состояния и состава атомарной плазмы. Мы надеемся, что рекомендуемые соотношения охватят достаточно широкий диапазон газоплазменных состояний, а их использование не вызовет трудностей у молодых ученых и аспирантов. Надежность предлагаемых соотношений обусловлена многолетним опытом работы авторов в этой области, особенно применительно к плотным парам металлов и инертным газам.

Итак, ограничимся, как и в [6], рассмотрением атомарной плазмы — плазмы, состоящей из электронов, ионов и атомов. С формальной точки зрения для расчета переносных коэффициентов необходимо, при известном составе, найти отклик функции распределения электронов по скоростям на внешнее возмущение, вызванное: приложенным электрическим полем (проводимость); градиентом плотности (диффузия); градиентом температуры (теплопроводность) и т.д. Для этого необходимо либо решить кинетическое уравнение Больцмана, либо воспользоваться соотношениями, следующими из теории линейного отклика. Оба этих пути трудоемки и требуют достаточно высокой квалификации

и больших затрат времени. Получить прямое решение интегро-дифференциального уравнения Больцмана не просто и таких работ немного. Существуют, однако, модели, допускающие аналитическое решение, на которых основаны практически все приближенные соотношения. К таковым в первую очередь относится решение уравнения Больцмана для лоренцевского газа: смеси небольшого количества легких частиц с тяжелыми. Малым параметром, допускающим точное решение, является отношение масс.

2. ЛОРЕНЦЕВСКИЙ ГАЗ

Применительно к атомарной плазме это реальный случай слабой ионизации, когда в атомарном газе присутствует небольшая примесь легких частиц — электронов — и, следовательно, межэлектронными столкновениями можно пренебречь. Рассчитывается отклонение функции распределения электронов f в газе атомов от равновесной f_0 [7], вызванное внешним возмущением. В этом случае интеграл столкновений Df/Dt упрощается и имеет вид:

$$\frac{Df}{Dt} = -\nu_{ea}(E)(f - f_0). \quad (1)$$

В (1) $\nu_{ea}(E) = \sqrt{\frac{2E}{m}} n_a Q_{ea}^{(t)}(E)$ — частота столкновений электрона с атомами, а $Q_{ea}^{(t)}(E)$ — транспортное сечение рассеяния электрона на атоме. Для плазмы паров металлов, например, весьма удобно выражение сечения через поляризуемость атома P_a [7]:

$$Q_{ea}^{(t)}(E) = \frac{\pi^2 \sqrt{3}}{2} \sqrt{P_a a_0^2} \sqrt{\frac{Ry}{E}}. \quad (2)$$

В (2) P_a — поляризуемость атома в атомных единицах.

Естественно, возможно использование и более точных соотношений для транспортных сечений (см., например, [8, 9]). Удобные и простые формулы для расчета транспортных сечений рассеяния электронов на атомах инертных газов и на водороде можно найти в [10]. Подчеркнем, что расчет сечений рассеяния электронов на атомах, молекулах и т.д. — это отдельный раздел данной проблемы, да и атомной физики в целом. Задача эта непростая и здесь постоянно ведутся исследования по

уточнению существующих выражений для сечений рассеяния. Пользователь должен самостоятельно принять решение о точности своих оценок, а отсюда и о точности используемых выражений для сечений.

В результате для проводимости классических, невырожденных электронов в среде тяжелых нейтральных рассеивателей мы получаем соотношение для проводимости, которое можно считать точным, полученным из решения уравнения Больцмана:

$$\sigma_L = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{T}\right) E^{3/2} \frac{dE}{\nu_{ea}(E)}, \quad (3)$$

где e и m_e — заряд и масса электрона, соответственно.

Заметим, что в лоренцевском приближении частота столкновений (1) возникает при решении уравнения Больцмана.

3. ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛНОСТЬЮ ИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЫ. ФОРМУЛА СПИТЦЕРА

Методически примыкает к Лоренцевскому газу и полностью ионизованная плазма с одним важным отличием: легких частиц n_e в ней столько же, сколько тяжелых n_i . Межэлектронными столкновениями пренебречь нельзя, а роль их специфическая — они симметризируют функцию распределения по скоростям, нарушенную внешним полем. Учет межэлектронных столкновений возможен только путем решения уравнения Больцмана. Задача эта весьма непростая, поскольку требует решения интегро-дифференциального уравнения. Впервые для плазмы она была решена Спитцером и Хэрмом [11]. Иные решения можно найти в [12]. В [11] была получена знаменитая константа Спитцера–Хэрма $\gamma_S = 0.582$. Она показывает во сколько раз электрон-электронные удары уменьшают проводимость плазмы в лоренцевском приближении для ионов.

Детали процедуры решения уравнения Больцмана для полностью ионизованной плазмы с различной экранировкой и без упрощения кулоновского логарифма можно найти в [13]. Из этой работы следует, что “вывести” выражение для кулоновского логарифма $\Lambda_{ei}(\Gamma)$ невозможно. Он является расчетной величиной, тем более с учетом электрон-электронных соударений. Единственным результатом решения уравнения Больцмана для полностью ионизованной плазмы является величина проводимости. Для анализа решения удобно выделить, хотя и не обязательно, множитель Спитцера и “кулоновский логарифм”. Такая процедура проделана в [13]. Мы в своих расчетах остановились на достаточно простой формуле, “вывести” которую невозможно:

$$\Lambda_{ei}(\Gamma) = \ln\left(1 + \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma}\right), \quad (4)$$

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{R_D}, \quad (5)$$

где $R_D = (4\pi\beta e^2(n_e + n_i))^{-1/2}$ — дебаевский радиус. Вводя частоту столкновений

$$\nu_{ei}(E, \Gamma) = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \left[n_i 4\pi \left(\frac{e^2}{2E} \right)^2 \ln\left(1 + \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma}\right) \right], \quad (6)$$

и, учитывая полученный в [11] множитель γ_S , можно

представить спитцеровское выражение для проводимости в виде:

$$\sigma_S = \gamma_S \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{T}\right) E^{3/2} \frac{dE}{\nu_{ei}(E, \Gamma)}. \quad (7)$$

Конечно, это не “вывод” формулы, а иллюстрация, поскольку множитель γ_S получался в [11] в виде отношения полного решения к Лоренцевскому. Мы акцентируем на этом моменте внимание, поскольку в некоторых работах уточнение формулы Спитцера начинают с выражения (7). Подчеркнем, что в (7) допускается использование и иных выражений для кулоновского логарифма. Главное, чтобы они соответствовали аналитическим решениям [1, 11–13] и эксперименту. Упрощения (7), приводящие к расчетным соотношениям, рассмотрим ниже.

4. τ -ПРИБЛИЖЕНИЕ

Это приближение весьма похоже на лоренцевское, но тем не менее принципиально отличается от него. В этом приближении вместо транспортного сечения используется некое эффективное время между столкновениями $\tau(E)$, что позволяет упростить интеграл столкновений [7]:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{f - f_0}{\tau(E)}. \quad (8)$$

Для проводимости сразу имеем:

$$\sigma_\tau = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{T}\right) E^{3/2} \tau(E) dE. \quad (9)$$

С формальной точки зрения выбор $\tau(E)$ произволен и к этой процедуре мы вернемся ниже, так как тут возможны разные варианты.

5. ФОРМУЛА ЗАЙМАНА ДЛЯ МЕТАЛЛОВ

В ее основе лежит расчет частоты столкновений квантового (холодного) электрона проводимости с ионной решеткой в борновском приближении [5]:

$$\nu_Z = \frac{1}{\tau_Z} = \frac{m}{12\pi^3 \hbar^3 Z} \int_0^{2k_F} S(x) |u(x)|^2 x^2 dx, \quad (10)$$

где $S(x)$ — структурный фактор решетки, $u(x) = 4\pi e^2 / (x^2 + x_0^2)$ — Фурье-образ экранированного кулоновского потенциала, x , x_0 — текущий волновой вектор и вектор обрезания, Z — заряд иона.

Проводимость металла рассчитывается по формуле Друде:

$$\sigma_Z = n_e \frac{e^2}{m_e} \tau_Z. \quad (11)$$

Оригинальным в формуле (10) является расчет частоты столкновений электрона проводимости с решеткой в целом, но в борновском приближении, использование которого уменьшает область применимости (11). Конечно, есть работы [9, 14, 15], уточняющие результат Займана, но они сложны “для пользователей” и их использование возможно лишь с привлечением авторов.

Электрон–электронные столкновения не рассматриваются.

6. АДДИТИВНАЯ ФОРМУЛА

Это одна из первых приближенных формул, позволявшая оценить проводимость плазмы частично ионизованной. Предполагается, что сопротивление плазмы ρ_{ad} складывается из сопротивлений атомарной и ионной компонент:

$$\rho_{ad} = \rho_a + \rho_i. \quad (12)$$

Эта формула использовалась практически во всех ранних работах по исследованию проводимости неидеальной плазмы. С ее помощью из измеренной экспериментально проводимости частично ионизованной плазмы σ_{exp} извлекалась проводимость “заряженной” компоненты σ_i :

$$\sigma_i = \frac{1}{\left(\frac{1}{\sigma_{exp}} - \frac{1}{\sigma_a}\right)}. \quad (13)$$

Для расчета σ_a использовалась формула Лоренца (3). Точность аддитивной формулы была исследована [16]. Она оказалась весьма небольшой, погрешность достигала величины 50%. Возможно, этим обстоятельством обусловлен довольно сильный разброс извлеченных значений проводимости “заряженной” плазменной компоненты [17] из экспериментально измеренной.

7. ФОРМУЛА ФРОСТА

Наличие точных соотношений для полностью (7) и слабоионизованной (3) плазмы позволило Фросту [3] предложить интерполяционную формулу, носящую его имя. Она совпадала с точными решениями для слабо (3) и полностью ионизованной (7) плазмы. Точность такой интерполяции была неизвестна. Она была проверена путем сравнения с численным решением уравнения Больцмана [18] для плазмы частично ионизованной. В широком диапазоне состояний точность интерполяции оказалась менее 10% [16, 18], что можно считать вполне удовлетворительным в варианте “для пользователей”.

Формула Фроста строится с использованием τ -приближения с временем пробега τ_F :

$$\tau_F = \frac{1}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}. \quad (14)$$

В частоту столкновений, которая определяет величину τ , введен множитель $\gamma_S = 0.582$, полученный Спитцером для полностью ионизованной плазмы и учитывающий межэлектронные столкновения. Именно поэтому формула Фроста дает близкие к точным соотношения для полностью и слабоионизованной плазмы.

$$\sigma_F = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{E}{T}\right) E^{3/2} \frac{dE}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}. \quad (15)$$

8. ФОРМУЛА ЛОРЕНЦА–БЛОХА

Первоначально это приближение было предложено для расчета проводимости полупроводников и учиты-

вало столкновения квантового электрона из зоны проводимости с ионами и другими примесями [19]. Удачная модификация этого соотношения была предложена Старостиным с коллегами [4, 20, 21] для описания проводимости плотной неидеальной плазмы с вырожденными электронами для ненулевых температур. Эти соотношения похожи на формулу Фроста и также являются компиляцией τ -приближения, формулы Займана и Лоренца для вырожденных электронов. В [4, 20] предложено называть эту модель — моделью Лоренца–Блоха.

$$\sigma_{LB} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^2}{m_e T^{3/2}} \frac{2}{\lambda_e^3} \int_0^\infty E^{3/2} \tau_{LB}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE, \quad (16)$$

где

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/T}}, \quad (17)$$

$$n_e = \frac{4}{\sqrt{\pi} T^{3/2}} \frac{1}{\lambda_e^3} \int_0^\infty E^{1/2} f_0(E) dE. \quad (18)$$

При расчете сечения столкновения электрона с ионной подсистемой $Q_{ei}^{(S)}(E)$ используется формула Займана, что позволяет оценить влияние ионной структуры.

$$\frac{1}{\tau_{LB}(E)} = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} (n_a Q_{ea}(E) + n_i Q_{ei}^{(S)}(E)), \quad (19)$$

где

$$Q_{ei}^{(S)}(E) = \frac{Z_i^2 \pi e^4}{E^2} \Lambda_{ei}^{(S)}, \quad (20)$$

$$\Lambda_{ei}^{(S)} = \int_0^{q_m} \frac{k^3}{(k^2 + k_0^2)^2} S(k) dk. \quad (21)$$

Кулоновский логарифм упрощается, если допустить $S(k) \approx S(0)$. В этом приближении мы приходим к выражениям простым и достаточно удобным

$$\Lambda_{ei}^{(S)} = S(0) \int_0^{q_m} \frac{k^3}{(k^2 + k_0^2)^2} dk = \frac{S(0)}{2} \left[\ln(1 + \chi_i) - \frac{\chi_i}{1 + \chi_i} \right], \quad (22)$$

где $\chi_i = (q_m/k_0)^2$. Смысл констант обрезания q_m и k_0 можно найти в [21], там же анализируется десяток возможных комбинаций для их выбора.

Формула (22) — это тоже своего рода “кулоновский логарифм”. Конкретный выбор констант мы обсудим ниже в разделе, посвященном “кулоновскому логарифму”.

9. КУЛОНОВСКИЙ ЛОГАРИФМ

Ранние эксперименты, посвященные измерению проводимости неидеальной плазмы, были нацелены на исследование влияния эффектов неидеальности на проводимость полностью ионизованной плазмы, при расчете которой возникал кулоновский логарифм, да и на первом месте традиционно были эффекты неидеальности, связанные с взаимодействием между зарядами. Однако получить полностью ионизованную плазму с развитой кулоновской неидеальностью сразу, да и впоследствии, практически не удалось. Измеряли проводимость плазмы частично ионизованной. Извлекаемая из нее проводимость “полностью ионизованной” плазмы содержала неконтролируемые погрешности, имела сильный разброс [17] и не выявила заметных эффектов неидеаль-

ности. Ситуация несколько улучшилась при численном моделировании свойств неидеальной плазмы, когда удалось рассмотреть ряд моделей полностью ионизованной плазмы с развитой кулоновской неидеальностью. В серии работ Морозова и Нормана выполнен комплекс исследований динамических свойств модели неидеальной, полностью ионизованной плазмы и получены значения проводимости как статической, так и в переменном поле (см., например, [22]). В работе Зеленера с сотрудниками [23] моделировалась ультрахолодная плазма на этапе релаксации. Благодаря законам подобия удалось получить проводимость полностью ионизованной неидеальной плазмы. Данные этих работ подробно обсуждаются в [24].

Кулоновский логарифм возникает при решении парной задачи — расчете транспортного сечения рассеяния электрона, налетающего со скоростью v на ион. Для кулоновского потенциала оно расходится на больших прицельных параметрах и требует обрезания [2]. Возникает логарифмический член, в котором $b_0 = e^2/(mv^2)$, $b_{\max}$ — максимальный прицельный параметр. Для транспортного сечения первого порядка имеем:

$$Q_{\text{ei}}^{(t)} = 4\pi b_0^2 \ln \left[1 + \left(\frac{b_{\max}}{b_0} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (23)$$

Спитцер получил свои соотношения для плазмы высокотемпературной, в которой под знаком логарифма были использованы дополнительные упрощения ($b_{\max} = R_D$ и $b_0 = \beta e^2/3$), исключившие логарифмическую зависимость сечения от скорости.

В результате упрощений получаем:

$$\begin{aligned} \ln \left[1 + \left(\frac{b_{\max}}{b_0} \right)^2 \right]^{1/2} &\rightarrow \ln \left[1 + \left(\frac{3R_D}{\beta e^2} \right)^2 \right]^{1/2} \\ &\rightarrow \ln \left[1 + \left(\frac{3}{\Gamma} \right)^2 \right]^{1/2} \rightarrow \ln \left(\frac{3}{\Gamma} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Именно последний вариант кулоновского логарифма $\ln \left(\frac{3}{\Gamma} \right)$ мы находим у Спитцера [1] и Ландау [25] с одной оговоркой — Спитцер рассматривал только электронную экранировку, и в радиус Дебая входила только электронная плотность. Поэтому, если быть до конца точным, то спитцеровскому варианту соответствует величина $\ln \left(\frac{3\sqrt{2}}{\Gamma} \right)$.

Именно это выражение часто использовалось в экспериментальных, да и в численных работах, в качестве опорного выражения для проводимости идеальной плазмы, что не совсем верно. Такой выбор идеальной проводимости приводил к самой заметной величине эффектов неидеальности. Но уже простейшая модификация кулоновского логарифма, связанная с “возвращением единицы” под знак логарифма (24), заметно улучшала согласие с данными экспериментов [22]. Вариантов предлагалось достаточно много (см., например, [26, 27]). Следует признать, что, хотя работы [23, 24] и не выявили существенных эффектов неидеальности, но они позволили сделать выбор между десятками рекомендаций, предложенных в литературе для расчета “кулоновского логарифма”. Добавим, что при расчете проводимости плаз-

мы паров металлов (см. ниже) мы также использовали соотношение (5). Возможны, конечно, и иные варианты.

10. РАСЧЕТНАЯ ФОРМУЛА СПИТЦЕРА

Упростим выражение (7):

$$\begin{aligned} \sigma_S &= \gamma_S \frac{n_e}{n_i} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{6}{\pi\sqrt{2}} \frac{T^{3/2}}{\sqrt{m_e e^2 \Lambda(\Gamma)}} = \gamma_S \frac{n_e}{n_i} \frac{T^{3/2}}{\sqrt{m_e e^2 \Lambda(\Gamma)}} 1.016 \\ &= 0.591 \frac{T^{3/2}}{\sqrt{m_e e^2 \Lambda(\Gamma)}} [\text{CGC}] = 191 T^{3/2} \frac{1}{\Lambda(\Gamma)} [(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}]. \end{aligned} \quad (25)$$

Единая методика выбора кулоновского логарифма отсутствует и все определяется позицией автора, его здравым смыслом и, конечно, согласием с экспериментом.

11. КУЛОНОВСКИЙ ЛОГАРИФМ ДЛЯ ВЫРОЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ФОРМУЛЕ ЗАЙМАНА И ЛОРЕНЦА–БЛОХА

Кулоновский логарифм в этом случае определяется соотношениями (21), (22). Для его расчета необходим расчет структурного фактора для кулоновских остовов и выбор параметров обрезания $\chi_i = (q_m/k_0)^2$. В [20, 21] подробно обсуждается около десятка вариантов выбора констант и большинство из них связано с многочисленными рекомендациями, следующими из дебаевской теории экранирования и нацеленными на плазму сверхплотную. Для плазмы паров металлов вблизи линии плавления мы предлагаем для радиуса экранировки величину радиуса ячейки Вигнера–Зейтца:

$$\frac{1}{k_0} = R_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3}, \quad (26)$$

а для

$$q_m = 2k_F = 2(3\pi^2 n_e)^{1/3}. \quad (27)$$

Такой выбор параметров существенно упрощает расчет кулоновского логарифма. Считая $n_e = Zn_i$, для χ_i из (22) получим весьма простое выражение:

$$\chi_i = (18\pi Z)^{2/3}. \quad (28)$$

Для структурного фактора на уровне оценок можно рекомендовать структурный фактор при нулевом импульсе для модели твердых сфер [28]:

$$S_{\text{HS}}(0) = \frac{(1-\eta)^4}{(1+2\eta)^2}, \quad (29)$$

где η — параметр упаковки ионных остовов.

12. ФОРМУЛА РЕГЕЛЯ–ИОФФЕ

Это соотношение было предложено в [29] для оценки минимальной металлической проводимости и основано на формуле Друде:

$$\sigma_{\text{RI}} = n_e \frac{e^2}{m_e} \tau_{\text{RI}}. \quad (30)$$

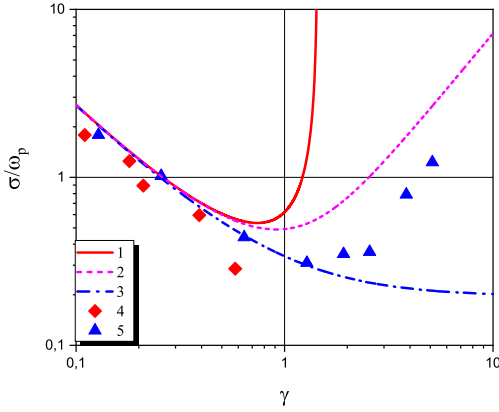


Рисунок 1. Зависимость безразмерной проводимости полностью ионизированной плазмы от параметра неидеальности Γ . Теория: расчет по формуле (25) с тремя значениями кулоновского логарифма: $1 - \ln \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma}$, $2 - \ln \left[1 + \left(\frac{3\sqrt{2}}{\Gamma} \right)^2 \right]^{1/2}$, $3 - \ln \left(1 + \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma} \right)$. Данные численного эксперимента: 4 — [23], 5 — [22].

Время τ_{RI} определяется как время пролета межъядерного расстояния, равного удвоенному радиусу атомарной ячейки Вигнера–Зейтца $2R_a$ с фермиевской скоростью $v_F = p_F/m_e$:

$$\frac{\tau}{m_e} = \frac{2R_a}{p_F}, \quad (31)$$

где $p_F = (3\pi^2 n_j)^{1/3} \hbar$ — импульс Ферми электронов проводимости.

В итоге получаем следующее расчетное выражение для проводимости (все величины в CGSE, ответ в $(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$):

$$\sigma_{\text{RI}} = n_e^{2/3} \frac{e^2}{9 \cdot 10^{11}} \frac{2R_a}{(3\pi^2)^{1/3} \hbar}. \quad (32)$$

Главной особенностью формулы Регеля–Иоффе, сделавшей ее востребованной, является ее независимость от выбора сечения электрон-ионного рассеяния, а стало быть, и от процедур его обрезания (“кулоновского логарифма”).

13. СРАВНЕНИЕ С ДАННЫМИ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

На рисунке 1, взятом нами из [24], нанесены численные данные работ [22, 23] и некоторые аналитические расчеты с разными “кулоновскими логарифмами”. Нам для анализа и рекомендаций важен общий вид графика. Рекомендуемое нами выражение (5) неплохо описывает данные численного моделирования вплоть до $\Gamma < 3$, что вполне достаточно “для пользователей”. Особенности поведения проводимости при $\Gamma > 3$ обсуждаются в [30]. Вариант под номером 2 тоже неплох при умеренных Γ , но имеет худшие экстраполяционные свойства.

В определенном смысле численные расчеты [22, 23] решили проблему “кулоновского логарифма” для $\Gamma < 3$.

14. НАСЫЩЕННЫЕ ПАРЫ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Измеренная Хенселем проводимость паров цезия на газовой ветви бинадали поставила ряд принципиальных вопросов в физике неидеальной плазмы. Попытки описать рост проводимости насыщенных паров при сжатии, используя эффект снижения потенциала ионизации, не привели к успеху [3]. Ликальтеру [31, 32] удалось качественно описать рост проводимости паров при сжатии, используя для расчета проводимости элементы теории протекания для связанных электронов. Нами введено понятие электронного желе для газовой фазы. Расчет проводимости в критической точке паров щелочных металлов изложен в [33], а для околоскритических изотерм металлов — в [34]. Для проводимости электронов желе n_j мы использовали формулу Регеля–Иоффе:

$$\sigma_j = n_j^{2/3} \frac{e^2}{9 \cdot 10^{11}} \frac{2R_a}{(3\pi^2)^{1/3} \hbar}, \quad (33)$$

где n_j — концентрация электронов желе, R_a — радиус ячейки Вигнера–Зейтца для атомарной компоненты. Детали расчета см. в [33, 34].

15. ПРИМЕРЫ КОНКРЕТНЫХ РАСЧЕТОВ

В достаточно широком диапазоне газоплазменных состояний можно выделить три типа носителей тока. Это прежде всего термически ионизованные свободные электроны, возникающие из связанных состояний при термической ионизации. Их концентрация определяется хорошо известной формулой Саха, приводящей к степени термической ионизации α . На концентрацию свободных электронов влияют не только температура, но и давление через эффект снижения потенциала ионизации — взаимодействия частиц в непрерывном спектре. Снижение потенциала ионизации в последнее время считалось главным эффектом неидеальности и получило название “ионизация давлением”. Все необходимые для расчета соотношения приведены в [6]. Возможно использование модели “3+” [34]. Термические электроны присутствуют в плазме уже при температуре в несколько тысяч градусов. Все определяется отношением потенциала ионизации к температуре. Несколько особняком стоят пары щелочных металлов с самыми низкими потенциалами ионизации. Проводимость термически ионизованных электронов мы рекомендуем рассчитывать по формуле Фроста (15). Она с приемлемой точностью ($< 10\%$) описывает плавный переход от проводимости полностью ионизованной плазмы к проводимости плазмы частично ионизованной. Этот переход иллюстрируется стрелкой на рисунке 2. По мере приближения к критической точке начинают проявлять себя электроны желе.

На рисунке 3 граница этой области показана для паров алюминия [36]. При температуре больше 18000 К основной вклад в проводимость вносят термически ионизованные электроны. Для расчета вклада электронов желе необходимо рассчитать степень “холодной” ионизации α_j . С многочисленными примерами расчета этой величины для различных металлов можно ознакомиться в [33, 36]. Зная концентрацию электронов желе $n_j = \alpha_j n_a$ и радиус атомарной ячейки Вигнера–

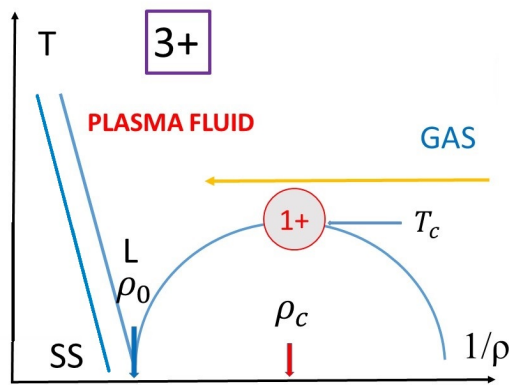


Рисунок 2. Фазовая диаграмма вещества в координатах температура–объём. Отмечена нормальная ρ_0 , критическая плотность ρ_c и критическая температура T_c . Агрегатные состояния вещества: SS — твердое тело; L — жидкость; GAS — газ.

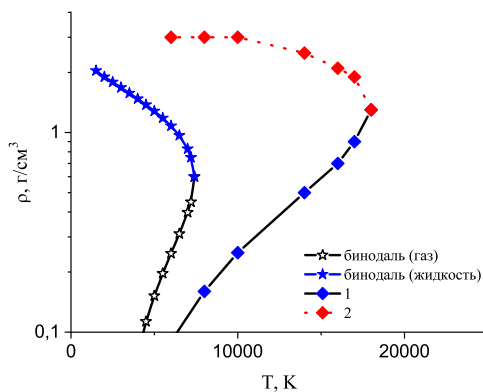


Рисунок 3. Окрестность бинодали алюминия. Сплошная кривая со звездами соответствует рассчитанной в работе [35] бинодали. Сплошная и пунктирная кривые с ромбами (1 и 2) описывают случай, когда степень термической ионизации равна степени ионизации “холодной”.

Зейтца R_a , вклад электронов желе в общую проводимость рассчитывается по соотношению (33). Для полной проводимости следует брать сумму проводимостей для термических электронов (15) и электронов желе (33) (см. рисунок 4). Обращаем внимание на две характерные для всех металлов особенности поведения проводимости. При низких плотностях она описывается формулой Спитцера. По мере сжатия начинается рост концентрации атомов, что усиливает роль столкновений с ними. Рост концентрации атомов приводит к росту концентрации электронов желе и необходимо аддитивно учитывать их вклад в проводимость (33). При дальнейшем сжатии проводимость перестает зависеть от температуры в соответствии с (33). Проводимость на бинодали является огибающей всех изотерм (см. рисунок 4).

При дальнейшем увеличении плотности и приближении к нормальной плотности металла появляются зачатки структуры решетки и дальний порядок, электроны превращаются в Блоховские. Это самая сложная об-

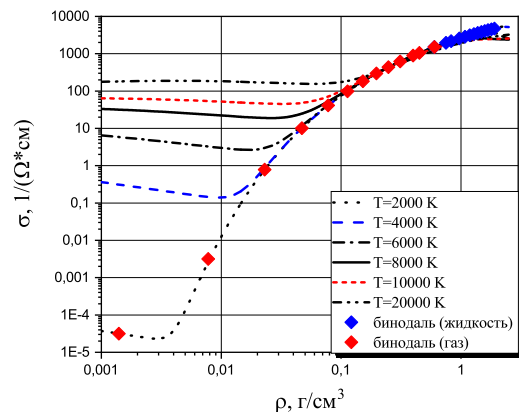


Рисунок 4. Проводимость на изотермах плазмы паров алюминия.

ласть для расчетов, поскольку простых моделей, описывающих этот сложный переход в электронной компоненте, не существует. Мы рекомендуем в этой области формулу Лоренца–Блоха (16), либо непосредственный расчет по формуле Займана (10). Этой области на фазовой диаграмме рисунка 2 соответствует район пересечения стрелки с кривыми плавления и сублимации (слева). При околоскритических плотностях хорошо зарекомендовала себя гипотеза о существовании электронного желе с использованием формулы Регеля–Иоффе [29].

16. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнен краткий обзор существующих формул, используемых для расчета проводимости газоплазменных сред. Рекомендуемая методика расчета проводимости атомарной плазмы охватывает большую область фазовой диаграммы вещества: разреженный газ, околоскритическую область, вплоть до линии плавления. Нами показано, что “для пользователей” в этой области можно ограничиться формулой Фроста (15) с обязательным расчетом вклада в проводимость электронов желе. Эти две компоненты определяют проводимость паров большинства металлов до тех пор, пока электронный газ является невырожденным. При приближении к кривой плавления следует использовать либо формулу Лоренца–Блоха (16), либо формулу Займана (10).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Спитцер Л 1965 *Физика Полностью Ионизованного Газы* (Москва: Мир)
2. Лифшиц Е М и Питаевский Л П 1979 *Физическая Кинетика* (Москва: Наука)
3. Фортон В Е, Храпак А Г и Якубов И Т 2010 *Физика Неидеальной Плазмы* (Москва: Физматлит)
4. Грязнов В К, Иванов Ю В, Старостин А Н и Фортон В Е 1976 *ТВТ* **14** 643–646
5. Ziman J M 1972 *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge: Cambridge University Press)
6. Хомкин А Л и Шумихин А С 2019 *Вестник ОИВТ РАН* **2** 19–26
7. Ландау Л Д и Лифшиц Е М 1974 *Квантовая Механика. Нерелятивистская Теория* (Москва: Наука)
8. Апфельбаум Е М 2017 *ТВТ* **55** 3
9. Apfelbaum E M 2019 *Contrib. Plasma Phys.* **59**

10. Хомкин А Л 1978 *ТВТ* **16** 37–42
11. Спитцер Л и Хэрм Р 1956 *Явления Переноса в Полностью Ионизованном Газе (Проблемы Современной Физики т. 2)* (Москва: Изд-во иностр. лит.)
12. Хохштим А (ред.) 1971 *Кинетические Процессы в Газах и Плазме* (Москва: Атомиздат)
13. Заика Е В, Муленко И А и Хомкин А Л 2000 *ТВТ* **38** 5–11
14. Apfelbaum E M 2010 *Phys. Chem. Liq.* **48** 534–545
15. Redmer R, Reinholz H, Röpke G, Winter R, Noll F and Hensel F 1992 *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 1659–1669
16. Асиновский Э И и Батенин В М 1968 *ТВТ* **6** 966–972
17. Иванов Ю В, Минцев В Б, Фортов В Е и Дремин А Н 1976 *ЖЭТФ* **71** 216–224
18. Муленко И А и Хомкин А Л 1991 Кинетические коэффициенты неидеальной низкотемпературной плазмы *Препринт 1* (Москва: Институт высоких температур Академии наук СССР)
19. Аскеров Б М 1975 *Электронные Явления Переноса в Полупроводниках* (Москва: Наука)
20. Старостин А Н, Грязнов В К и Филиппов А В 2016 *Письма в ЖЭТФ* **104** 708–713
21. Филиппов А В, Старостин А Н и Грязнов В К 2018 *ЖЭТФ* **153** 514–524
22. Норман Г Э и Морозов И В 2005 *ЖЭТФ* **127** 412
23. Zelener B B, Zelener B V, Manykin E A, Bronin S Y and Bobrov A A 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **946** 012126
24. Хомкин А Л и Шумихин А С 2019 *ТВТ* **57** 501–508
25. Ландау Л Д 1937 *ЖЭТФ* **7** 203
26. Воробьев В С и Ликальтер А А 1989 *Химия Плазмы* **15** 163
27. Khrapak S A and Khrapak A G 2020 *Results in Physics* **17** 103163
28. Ashcroft N W and Lekner J 1966 *Phys. Rev.* **145** 83
29. Regel A R and Ioffe A F 1960 *Prog. Semicond.* **4** 237
30. Хомкин А Л и Шумихин А С 2020 *ТВТ* **58** 323–326
31. Ликальтер А А 1992 *УФН* **162** 119
32. Ликальтер А А 2000 *УФН* **170** 831
33. Khomkin A L and Shumikhin A S 2021 *Phys. Scr.* **96** 035806
34. Хомкин А Л и Шумихин А С 2017 *ЖЭТФ* **151** 1169
35. Хомкин А Л и Шумихин А С 2015 *ЖЭТФ* **148** 597
36. Хомкин А Л и Шумихин А С 2020 *ЖЭТФ* **157** 717–725