

НЕЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ ПОРОГОВЫХ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ

Н. Л. Александров, А. Н. Старостин*

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 17 октября 1997 г.

Исследуется влияние плотности среды на зависимость констант скорости неупругих процессов от температуры. Показано, что кроме эффектов типа снижения потенциала ионизации, ускоряющих процессы возбуждения и ионизации в неидеальной плазме, существует более сильный механизм такого ускорения, связанный с большой частотой соударений между частицами и приводящий к нарушению однозначной связи между энергией и импульсом частиц в плотной среде. Это проявляется в наличии степенных хвостов в равновесном распределении частиц по импульсам, приводящем к неэкспоненциальной температурной зависимости скоростей неупругих реакций в плотных газах и неидеальной плазме. Приведено кинетическое уравнение для обобщенной функции распределения электронов по энергиям и импульсам во внешнем электрическом поле, которое позволяет исследовать рассматриваемый эффект в неравновесных условиях.

1. ВВЕДЕНИЕ

Временная релаксация плотности частиц и возбужденных состояний в различных средах описывается соответствующими уравнениями баланса. Коэффициенты в этих уравнениях, называемые константами скорости, обычно не зависят от плотности частиц. Однако в плотных неидеальных средах сильное межчастичное взаимодействие приводит к появлению зависимости скорости элементарных процессов от плотности среды. Эффект наиболее выражен для пороговых процессов. Его изучение (в основном теоретическое) в настоящее время ограничивается процессами ионизации и возбуждения атомов электронным ударом (и обратными реакциями) и прилипанием электронов к молекулам [1–10]. При этом рассматривается неидеальность, вызванная как кулоновским взаимодействием в плазме [1–6], так и взаимодействиями электрон–атом и атом–атом при движении электронов в плотных газах и жидкости [7–10].

В настоящее время считается, что основной причиной изменения скорости пороговых электронных процессов с увеличением плотности среды является снижение их энергетического порога. Сам же характер температурной зависимости константы скорости остается экспоненциальным, хотя из-за возможной зависимости снижения потенциала ионизации от температуры он может не совпадать с законом Аррениуса. Другие эффекты, такие как вырождение электронного газа в плазме [4] или проявление структуры среды в жидкости [7, 8], считаются менее важными. Последовательный теоретический подход для определения снижения энергетического порога элементарных процессов

* E-mail: award@sunmipt.crec.mipt.ru

основывается на формализме кинетических функций Грина [11]. При таком рассмотрении, как правило, учитывается действительная часть плотностного сдвига энергии, а мнимой частью пренебрегается; т. е. считается, что энергия и импульс частиц однозначно связаны друг с другом. В то же время известно, что в плотных средах квантовая неопределенность энергии частиц, обусловленная их частыми столкновениями, приводит к нарушению однозначной связи между энергией и импульсом частиц [12]. В этом случае необходимо вводить обобщенную функцию распределения частиц по энергиям и импульсам и сечения рассеяния частиц вне массовой поверхности. Ранее этот формализм был использован для описания переноса резонансного излучения в плотных поглощающих средах [13]. Применительно к частицам было показано, что квантовая неопределенность энергии, возникающая в результате столкновений, приводит к появлению степенных хвостов в распределении частиц по импульсам даже в термодинамически равновесных условиях [14].

Цель данной работы состоит в теоретическом изучении температурной зависимости скорости пороговых процессов в плотных средах с учетом эффектов, к которым приводит квантовая неопределенность энергии частиц, вызванная межчастичным взаимодействием.

2. КАЧЕСТВЕННОЕ РАССМОТРЕНИЕ

Как показано в [13], для описания переноса резонансного излучения в плотных сильнопоглощающих средах, в которых длина пробега резонансного «фотона» соизмерима с его длиной волны, следует использовать обобщенную спектральную интенсивность $J(\omega, \mathbf{k})$, в которой частота ω и волновой вектор \mathbf{k} являются независимыми переменными. В [13] приведены уравнения, которым удовлетворяет $J(\omega, \mathbf{k})$, и рассмотрены некоторые следствия из решения этих уравнений, часть из которых удалось проверить экспериментально [15, 16]. Применительно к частицам аппарат обобщенных функций распределения по энергиям и импульсам $f(E, \mathbf{p})$ рассматривался в [12, 14, 17, 18]. Напомним основные определения, введенные в этих работах. Так, для $f(E, \mathbf{p})$ имеем

$$f(E, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} \int d\tau d^3\rho \exp(iE\tau - i\mathbf{p}\rho) \langle \hat{\Psi}^+(x_2) \hat{\Psi}(x_1) \rangle. \quad (1)$$

Здесь $\tau = t_1 - t_2$, $\rho = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\hat{\Psi}(x)$ — полевой оператор частицы в гейзенберговском представлении, а квантово-статистическое усреднение обозначено угловыми скобками. Для упрощения записи считаем пока $\hbar = 1$. По определению, энергия (частота) E и импульс \mathbf{p} в (1) являются независимыми переменными фурье-преобразования по разности времен и координат, и, например, значение E следует рассматривать на всей вещественной оси от $-\infty$ до $+\infty$. Введенная таким образом функция $f(E, \mathbf{p})$ является обобщением вигнеровского распределения (см. [12, 18], где и поясняется физический смысл этого распределения в квазиклассическом пределе). Интегрируя (1) по энергиям или по импульсам, можно получить распределения только по импульсам $f(\mathbf{p})$ или по энергии $f(E)$. В условиях термодинамического равновесия можно получить [12, 14, 18]

$$f(E, \mathbf{p}) = -i \frac{n(E)}{2\pi} (G^R(E, \mathbf{p}) - G^A(E, \mathbf{p})). \quad (2)$$

В (2) $n(E)$ — равновесные числа заполнения для частиц. Например, для фермионов

$$n(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/T} + 1}. \quad (3)$$

G^R и G^A — запаздывающая и опережающая функции Грина, связанные между собой соотношением

$$G^A = (G^R)^*.$$

Для $G^R(E, \mathbf{p})$ можно записать выражение

$$G^R(E, \mathbf{p}) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{p}} - \Sigma^R(E, \mathbf{p})}, \quad (4)$$

где $\epsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2M$, M — масса частицы, а массовый оператор Σ^R находится в соответствии с правилами диаграммной техники [12, 14, 17, 18]. Величина $\text{Re } \Sigma^R$ определяет сдвиг кинетической энергии частицы за счет ее взаимодействия с окружающими соседями, а $\text{Im } \Sigma^R$ — ширину или затухание возбуждения с энергией E и импульсом \mathbf{p} . Например, в слабонеидеальной плазме сдвиг энергии электронов (в данном случае это перенормировка химического потенциала электрона μ) можно представить в виде [11]

$$\text{Re } \Sigma^R = -\frac{\Gamma}{2} T, \quad (5)$$

где $\Gamma = e^2/r_D T$ — параметр взаимодействия, r_D — дебаевский радиус, T — температура, e — заряд электрона. В работах [1–8] при анализе влияния плотностных эффектов на константу скорости ионизации показано, что учет $\text{Re } \Sigma^R$ приводит в плотных средах к снижению потенциала ионизации (механизм снижения потенциала ионизации); в неидеальной плазме это вызывает экспоненциальное ускорение реакции ($\propto e^\Gamma$). Здесь следует отметить, что выражение (5) можно строго получить лишь в пределе $\Gamma \leq 1$, и количественно заметное ускорение реакции, имеющее место при $\Gamma > 1$, с точки зрения теории является экстраполяцией ее результатов за пределы применимости этой теории. В цитируемых работах [1–8] пренебрегается шириной $\text{Im } \Sigma^R$. В газовом приближении можно получить оценку

$$\text{Im } \Sigma^R \propto \nu \propto N \sigma v,$$

где ν — частота соударений, N — плотность частиц, σ — сечение рассеяния, v — скорость. Для кулоновского рассеяния имеем

$$\text{Im } \Sigma^R \propto \frac{\lambda}{r_D} \Gamma T. \quad (6)$$

Здесь λ — тепловая длина волны де-Бройля частицы, т. е. $\text{Im } \Sigma^R$ определяется квантовыми эффектами. В неидеальной плазме безразмерные параметры λ/r_D и Γ являются независимыми и легко реализуются условия, когда $\text{Im } \Sigma^R \propto \text{Re } \Sigma^R$.

В пределе низких плотностей при $\nu/T \ll 1$ и $\text{Re } \Sigma^R/T \ll 1$ из (2) можно получить

$$f(E, \mathbf{p}) = n(E) \delta \left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \right). \quad (7)$$

В этом случае энергия и импульс однозначно связаны соотношением дисперсии для свободной частицы $E = \mathbf{p}^2/2M$, так же как для фотонов в разреженном газе имеет место соотношение [13, 18]

$$J(\omega, \mathbf{k}) = n(\omega)\delta(\omega^2 - c^2k^2). \quad (8)$$

Эффекты взаимодействия уширяют δ -функции в (7), (8) и сдвигают энергии частиц или фотонов. Так, из (2), (4) получим вместо (7) аналог лоренцева профиля линии:

$$f(E, \mathbf{p}) = \frac{n(E)}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma^R}{(E - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \text{Re} \Sigma^R)^2 + (\text{Im} \Sigma^R)^2}. \quad (9)$$

Из-за конечности ширины $\text{Im} \Sigma^R$ из (9) следует, что при фиксированной энергии (частоте) E величина импульса может принимать любое значение, т. е. в плотной среде дисперсия свободной частицы $E = p^2/2M$ размывается из-за частых столкновений и в распределении по импульсам появляются степенные хвосты, существование которых впервые обсуждалось в работе [14]. Так, для невырожденных частиц, используя газовое приближение для вычисления Σ^R [14] и интегрируя (9) по энергиям, получим

$$f(\mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E, \mathbf{p}) = f_M(\mathbf{p}) + \frac{\hbar\nu_{\mathbf{p}}T}{2\pi\varepsilon_{\mathbf{p}}^2} e^{\mu/T}, \quad (10)$$

где $f_M(\mathbf{p})$ — максвелловское распределение частиц по импульсам, $\nu_{\mathbf{p}}$ — зависящая от импульса \mathbf{p} частота столкновений. Квантовая природа эффекта здесь подчеркнута явным введением постоянной Планка \hbar . В работе [14] выражение, аналогичное (10), получено для вырожденных частиц, и немаксвелловский член пропорционален квадрату плотности газа. Следует отметить, что наличие степенных хвостов в равновесном распределении частиц по импульсам может быть получено явно лишь в газовом приближении, т. е. когда для величины $\text{Im} \Sigma^R(E, \mathbf{p})$ использовано приближение парных соударений (ср. [14]). В общем случае неидеальных сред или газов высокой плотности, когда $\hbar\nu/T \geq 1$, это приближение может нарушаться и нахождение количественных ответов становится практически невозможным.

Однако в пределе относительно малой плотности наличие степенных хвостов может существенно повлиять на константы скорости процессов с большим энергетическим порогом. Для того чтобы подчеркнуть важность этого эффекта, отметим, что распределение частиц по энергиям, получаемое из (9) интегрированием по импульсам, остается экспоненциальным, в том числе и на далеких хвостах. Так, например, при $\nu = \nu_{\mathbf{p}} = \text{const}$ для $f(E)$ при $E > 0$ получим

$$f(E) = e^{(\mu-E)/T} \text{Re} \sqrt{E + i\nu}. \quad (11)$$

Для вычисления констант скорости процессов следует в общем случае интегрировать обобщенные сечения вне массовой поверхности (зависящие как от импульсов до и после рассеяния, так и от энергии E , не связанной с импульсами соотношениями типа (7)) с определенными выше обобщенными функциями распределения (1) (подробнее см. следующий раздел). Например, в борновском приближении для случая статического потенциала взаимодействия частиц амплитуда рассеяния и сечение определяются

фурье-компонентой потенциала и зависят только от разности импульсов. При усреднении сечения рассеяния в этом случае очевидно, что результат определяется функцией распределения по импульсам типа (10) и может сильно, на порядки величины, отличаться от стандартного ответа, учитывающего для больших импульсов только максвелловское распределение, т. е. первый член в (10).

Эффекты, связанные с наличием степенных хвостов в распределении частиц по импульсам, могут приводить к экспоненциальному ускорению реакций, таких как возбуждение и ионизация атомов и ионов электронным ударом, прилипание электронов к молекулам, $V - T$ -релаксация молекул, химические и ядерные превращения в плотных газах и неидеальной плазме. Причем эти эффекты не связаны напрямую с механизмом снижения потенциала ионизации, который по существу только и учитывался в работах [1–8], и проявляются при значениях $\Gamma \leq 1$, когда теория еще может быть применима.

3. КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ

Рассмотрим общее выражение для константы скорости процесса, в котором сталкивающиеся частицы e и a , находящиеся первоначально в состояниях $i(e)$ и $\alpha(a)$, переходят в состояния j и β . В борновском приближении этот процесс описывается диаграммой $\Sigma_{i\alpha, j\beta}^{+-} G_{\alpha}^{+-}$ [17, 18], приведенной на рис. 1. Для усредненной величины $\overline{n_e n_a k_{i\alpha, j\beta}}$ получим из этой диаграммы с использованием равновесных значений кинетических функций Грина [12, 17, 18]:

$$\begin{aligned} \overline{n_e n_a k_{i\alpha, j\beta}} = & \int \frac{d^4 p d^4 p_1 d^4 q}{(2\pi)^{12}} |V_{i\alpha, j\beta}(q)|^2 n_e(\omega_1) \delta_\gamma(\omega_1 - \varepsilon_p) \times \\ & \times (1 - n_e(\omega_1 + \omega)) \delta_\gamma(\omega_1 + \omega - \omega_{\beta\alpha} - \varepsilon_{p_1+q}) N_a(\omega_p) \times \\ & \times \delta_\gamma(\omega_p - E_p) (1 - N_a(\omega_p - \omega)) \delta_\gamma(\omega_p - \omega + \omega_{ij} - E_{p-q}). \end{aligned} \quad (12)$$

В (12) введены обозначения

$$n_e(\omega) = \frac{1}{e^{(\omega - \mu_e)/T} + 1}, \quad N_a(\omega) = \frac{1}{e^{(\omega - \mu_a)/T} + 1}, \quad \varepsilon_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}, \quad E_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2M_a},$$

$V_{i\alpha, j\beta}(q)$ — фурье-преобразование матричного элемента потенциала взаимодействия частиц для процесса $i(e), \alpha(a) \rightarrow j(e), \beta(a)$. В (12) использованы четырехмерные векторы $p(\mathbf{p}, \omega_p)$, $p_1(\mathbf{p}_1, \omega_1)$, $q(\mathbf{q}, \omega)$. Величина $\delta_\gamma(\omega - \varepsilon_p)$ имеет вид (ср. [19]):

$$\delta_\gamma(\omega - \varepsilon_p) = \frac{\gamma(\omega, \mathbf{p})}{\pi \left[(\omega - \varepsilon_p - \Delta(\omega, \mathbf{p}))^2 + \gamma^2(\omega, \mathbf{p}) \right]} \quad (13)$$

Формула (13) записана аналогично (9), ширина γ эквивалентна величине $\text{Im } \Sigma^R$, сдвиг $\Delta = \text{Re } \Sigma^R$. В пределе $\gamma, \Delta \rightarrow 0$ (12) переходит в обычное выражение для константы скорости, если опустить эффекты Паули, т. е., считая числа заполнения малыми, пренебречь ими по сравнению с 1:

$$\begin{aligned} \overline{n_e n_a k_{i\alpha, j\beta}} = & \int \frac{d^3 p d^3 p_1 d^3 q}{(2\pi)^{12}} |V_{i\alpha, j\beta}(\mathbf{q})|^2 n_e(\varepsilon_{p_1}) \times \\ & \times N_a(E_p) \delta(\varepsilon_{p_1} + E_p + \omega_{ij} + \omega_{\alpha\beta} - \varepsilon_{p_1+q} - E_{p-q}). \end{aligned} \quad (14)$$

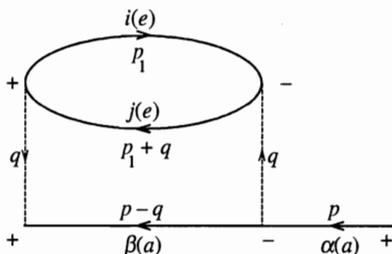


Рис. 1. Диаграмма процесса в борновском приближении

Таким образом, общее выражение (12) содержит обобщенные функции распределения $f_e(\omega_1, \mathbf{p}_1)$ и $f_a(\omega_p, \mathbf{p})$ для сталкивающихся частиц и учитывает вырождение и принцип Паули (множители типа $1 - n$). Обычные δ -функции, выражающие законы сохранения энергии, в (12) заменены лоренцианами типа (13) с конечными шириной и сдвигом. В общем случае ширина γ определяется всеми процессами взаимодействия данной частицы с окружающими, и для ее нахождения следует решать многомерные, нелинейные интегральные уравнения (ср. [12, 19, 20], согласованно используя выражения типа (12), (13), так как

$$\gamma_e \equiv \text{Im} \Sigma^R \propto \sum_{i\alpha, j\beta} \overline{n_a k_{i\alpha, j\beta}}$$

В случае, когда сталкивающиеся частицы не являются равновесными, из рис. 1 можно получить более общее выражение:

$$\begin{aligned} \overline{n_e n_a k_{i\alpha, j\beta}} &= \int \Sigma_{i\alpha, j\beta}^{+-} G_{a, \alpha}^{-+} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} = \int G_{e, i}^{-+}(p_1) G_{a, \beta}^{+-}(p - q) G_{e, j}^{+-}(p_1 + q) \times \\ &\times G_{a, \alpha}^{-+}(p) |V_{i\alpha, j\beta}(q)|^2 \frac{d^4 p d^4 p_1 d^4 q}{(2\pi)^{12}}, \end{aligned} \tag{15}$$

где функции Грина $G^{\alpha\alpha'}(p)$ [12, 17, 18] для каждого сорта частиц следует находить из решения обобщенных кинетических уравнений [12, 18–20]. Отметим, что кинетические уравнения для функций распределения частиц по импульсам, получаемые интегрированием по энергиям уравнений для обобщенных функций распределения $f(E, \mathbf{p})$ (или эквивалентных им функций Грина $G^{-+}(E, \mathbf{p}) = 2\pi i f(E, \mathbf{p})$) получаются в замкнутом виде только с использованием приближения $\gamma \rightarrow 0$, т. е. при замене величин $\delta_\gamma(\omega - \varepsilon_p)$ на обычные δ -функции [12, 17, 18]. Аналогичная ситуация имеет место в теории переноса резонансного излучения в плотных диспергирующих средах, где из уравнения для обобщенной спектральной интенсивности $J(\omega, \mathbf{k})$ в общем случае нельзя получить замкнутое уравнение для J_ω с помощью интегрирования уравнения для $J(\omega, \mathbf{k})$ по волновым векторам [13]. Пример такого обобщенного кинетического уравнения для функции распределения электронов $f(E, \mathbf{p})$ в плотном лоренцевом газе приводится в следующем разделе.

Выражение (15) можно обобщить, избавившись от борновского приближения для описания соударения. Для этого следует рассмотреть диаграммы лестничного вида с любым числом перекладин (см. рис. 2), но с одной переменной знака «-» на «+», чтобы оставаться в рамках газового приближения парных соударений.

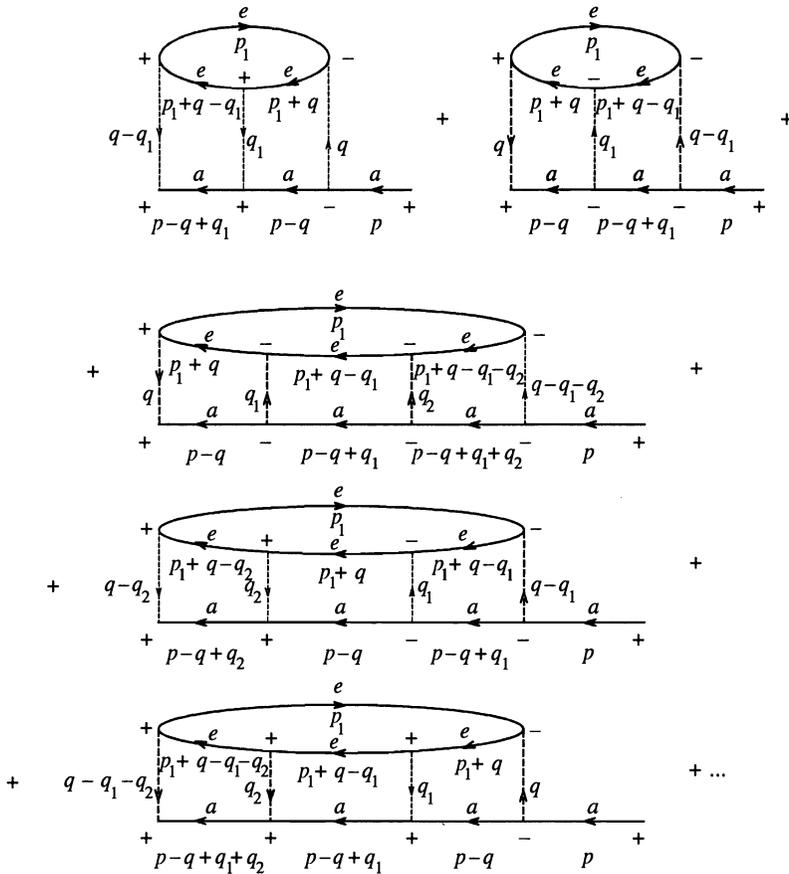


Рис. 2. Сумма диаграмм лестничного вида

Можно показать (ср. [12, 21, 22]), что в (15) вместо квадрата модуля фурье-преобразования матричного элемента потенциала взаимодействия V_q следует использовать квадрат модуля амплитуды рассеяния частиц в среде $T(p, p_1, q)$, удовлетворяющей уравнению

$$T(p, p_1, q) = V_q + \int V_{q-q_1} G_e^{--}(p_1 + q - q_1) G_a^{--}(p - q - q_1) T(p, p_1, q_1) \frac{d^4 q_1}{(2\pi)^4}. \quad (16)$$

Здесь для простоты записи мы ограничились упругим рассеянием. В равновесном случае $G^{--}(p)$ можно записать в виде [18]:

$$G^{--}(p) = (1 - n(E)) G^R + n(E) G^A.$$

Как показано в [21, 22], в газовом приближении при нахождении T можно ограничиться амплитудой рассеяния частиц в вакууме $T(p, p_1, q) \approx f(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q})$, удовлетворяющей обычному уравнению Липпмана-Швингера. В этом приближении амплитуда рассеяния зависит только от относительных импульсов частиц в системе центра масс

до и после рассеяния, причем эти импульсы лежат вне массовой поверхности, т. е.

$$p_i \neq p_f, \quad \mathbf{p}_i = \frac{m_a \mathbf{p}_e - m_e \mathbf{p}_a}{m_a + m_e}, \quad \mathbf{p}_f = \mathbf{p}_i + \mathbf{q}.$$

Энергетическая переменная $E = \omega + \omega_1$ присутствует в общем выражении для $T(p, p_1, q)$, но выпадает в описанном приближении, так как вакуумная амплитуда рассеяния вне массовой поверхности зависит только от трехмерных относительных импульсов [21, 22].

Для получения качественных и количественных ответов выражения типа (12), (15) следует упростить. Предположим, что тяжелые невырожденные частицы сорта a слабо взаимодействуют с другими частицами, т. е. $\gamma_a \rightarrow 0, \Delta_a \rightarrow 0$. Например, частицы сорта a соответствуют нейтральным атомам, плотность которых может быть большой, но $N_a \sigma_{aa} \nu_a \ll T$. Частицы сорта e соответствуют электронам, для которых учтем частые соударения с нейтральными частицами и ионами, так что $\gamma_e \neq 0$.

В этом предположении из (15), (16) следует

$$\overline{n_e k_{i,j}} = \int \frac{dE d^3 p d^3 p'}{(2\pi)^7} n(E) (1 - n(E - I)) |f_{i,j}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|^2 \times \delta_\gamma(E - \varepsilon_e(\mathbf{p})) \delta_\gamma(E - I - \varepsilon_e(\mathbf{p}')). \quad (17)$$

В (17) I соответствует пороговой энергии неупругого процесса возбуждения или ионизации. Плотностной сдвиг энергии может изменить величину I , что эквивалентно учету механизма снижения потенциала ионизации.

Рассмотрим сначала случай относительно низких температур электронов ($I/T \gg 1$) и для качественной оценки воспользуемся приближением $f_{i,j}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \approx f_{ij} = \text{const}$. Вблизи порога неупругого процесса это приближение достаточно разумно [23]. Пренебрежем вырождением электронов и будем считать ширину константой $\gamma(E, \mathbf{p}) = \gamma = \text{const}$, что приближенно описывает рассеяние электронов на нейтральных атомах, например, на атомах He, где $\sigma v = \text{const}$. В этом модельном случае в (17) можно провести интегрирование по импульсам \mathbf{p} и \mathbf{p}' в явном виде, и для константы возбуждения k_{ex} (ионизации k_{ion}) получим в описанном приближении

$$\overline{n k_{ex(ion)}} = A_{ex(ion)} \int dE n(E) \text{Re} \sqrt{E + i\gamma} \text{Re} \sqrt{E - I + i\gamma}. \quad (18)$$

Здесь $A_{ex(ion)}$ — нормировочная константа, содержащая в том числе и значение постоянной $|f_{ij}|^2$. При $\gamma \rightarrow 0$ из (18) следует обычное околупороговое приближение для константы скорости процесса:

$$\overline{n k_{ex(ion)}} = A_{ex(ion)} \int_I^\infty dE n(E) \sqrt{E} \sqrt{E - I}. \quad (19)$$

Однако при $\gamma \neq 0$ из (18) следует, что в интеграл по энергиям дают ненулевой вклад значения E , меньшие I , что в данном случае отражает описанное выше влияние степенных хвостов в распределении частиц по импульсам. Из (18) можно получить оценку

$$k_{ex(ion)} = k_{ex(ion)}^{(0)} \left(e^{-I/T} + \frac{\hbar\gamma}{2I} \right). \quad (20)$$

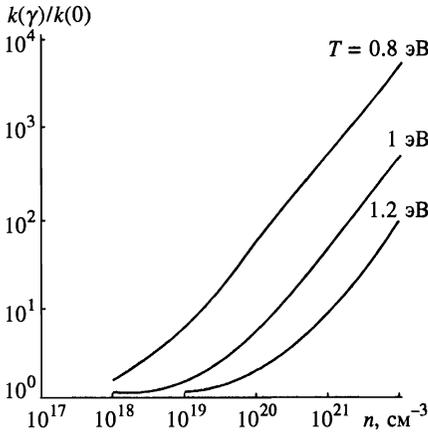


Рис. 3

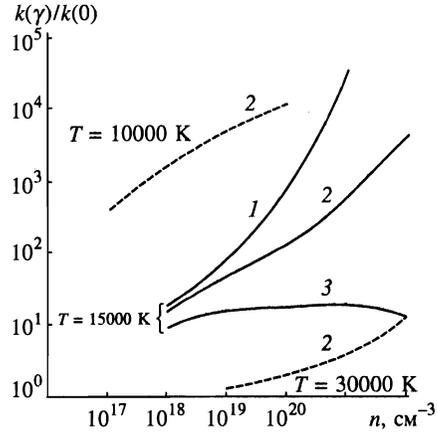


Рис. 4

Рис. 3. Скорость ионизации атомов электронным ударом в модельном газе с $I = 10$ эВ и $\gamma = \text{const}$ в зависимости от плотности газа

Рис. 4. Скорость ионизации в неидеальной водородной плазме в зависимости от ее плотности: 1 — отношение результата настоящей работы в пренебрежении вырождением электронов к результату традиционного подхода; 2 — отношение той же величины к результату теории [1-6]; 3 — то же, что и кривая 1, но с учетом вырождения электронов

Второе, неэкспоненциальное, слагаемое в (20) может быть мало по сравнению с единицей (при $\hbar\gamma \ll I$), но при низких температурах на много порядков превышать первое слагаемое. В этом смысле можно говорить об экспоненциальном ускорении реакции в плотных газах за счет наличия степенных хвостов в распределении частиц по импульсам. С ростом температуры и при низких плотностях газа реализуется обычное выражение $k \propto e^{-I/T}$. Учет механизма снижения потенциала ионизации, хотя и увеличивает скорость реакции, но в данных условиях оказывается менее важным, чем учет конечной ширины в (17). Для оценки аналогичного увеличения константы скорости возбуждения (ионизации) в неидеальной плазме мы проводили численное интегрирование выражения (17) в приближении $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f = \text{const}$, но с учетом зависимости ширины γ от импульса $\gamma(E, \mathbf{p}) \approx \gamma_p = N_i \sigma_C v$, где N_i — концентрация ионов, σ_C — кулоновское сечение транспортного рассеяния, $\sigma_C \propto (\pi e^4 / \varepsilon^2) \Lambda$, Λ — кулоновский логарифм. На рис. 3, 4 приведены результаты численного интегрирования выражения (17) для оценки скорости ионизации атомов модельного плотного нейтрального газа (приближение (18)) и в неидеальной плазме.

Как видно из рис. 3, скорость ионизации плотного газа при низких температурах растет с увеличением плотности степенным, а не экспоненциальным образом (что отражено вторым слагаемым в (20)). В работе [7] (см. также [8]) аналогичные расчеты выполнялись только с учетом механизма снижения потенциала ионизации, приводящим к экспоненциальной зависимости $k_{\text{ион}}$ от плотности газа, и проводилось сравнение с экспериментом в жидком Хе. К сожалению, из-за большой ошибки измерений

в области низких значений параметра E/N (E — напряженность электрического поля, N — плотность атомов), определяющего среднюю энергию электронов, сделать однозначный выбор в пользу степенной или экспоненциальной зависимости k_{ion} от N затруднительно. Из расчетов, результаты которых представлены на рис. 4, можно сделать следующие выводы: а) увеличение константы скорости ионизации за счет учета конечной ширины γ (см. выражения (12), (17)), приводящей к наличию степенных хвостов в распределении частиц по импульсам, оказывается существенно большим, чем при учете механизма снижения потенциала ионизации; б) это ускорение имеет место при значениях параметра неидеальности $\Gamma \leq 1$, где теория может быть обоснована, тогда как механизм снижения потенциала ионизации дает большой эффект при $\Gamma > 1$, т. е. за рамками применимости теории; в) учет эффектов вырождения в представленной здесь теории более существен, чем в работах [1–6]. Для проверки развитой теории необходимы специальные и достаточно точные эксперименты, например, по измерению констант возбуждения или ионизации в неидеальной плазме или, что то же самое, по измерению времен установления зарядового состава.

4. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ОБОБЩЕННОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В работах [4,6] исследовалось влияние механизма снижения потенциала ионизации на скорость ионизации атомов электронным ударом в неравновесной плазме, помещенной в достаточно сильное электрическое поле. Поскольку уже в равновесных условиях, как показано выше, влияние неидеальности не сводится только к этому механизму, возникает вопрос об обобщении развиваемой теории на неравновесные условия. Рассмотрим модель лоренцева газа для электронов во внешнем электрическом поле. Эта модель предполагает, что электроны сталкиваются только с нейтральными атомами, функция распределения которых считается известной. В такой постановке задача является линейной, и в случае газов достаточно низкой плотности, когда пренебрегается шириной γ (т. е. δ_γ в (12) заменяется обычной δ -функцией), она хорошо изучена применительно к описанию кинетики электронов в слабоионизованных газах [24, 25].

Вывод обобщенных кинетических уравнений приведем по аналогии с [18], используя те же обозначения для кинетических функций Грина электронов $G^{\alpha\alpha'}(x_1, x_2)$, где $\alpha, \alpha' = \pm$ соответствуют типу хронологического упорядочения. В матричной записи по отношению к индексам α, α' функция Грина электронов удовлетворяет уравнениям [18]

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12} = \sigma_z \delta(x_1 - x_2) + \int \sigma_z \Sigma_{13} G_{32} d^4 x_3, \quad (21)$$

$$\hat{G}_{02}^{-1} G_{12} = \sigma_z \delta(x_1 - x_2) + \int G_{13} \Sigma_{32} \sigma_z d^4 x_3. \quad (22)$$

Здесь \hat{G}_{01}^{-1} , \hat{G}_{02}^{-1} и σ_z обозначают операторы

$$\hat{G}_{01}^{-1} = i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{1}{2m} \Delta_1 - U(x_1) + \mu, \quad (23)$$

$$\hat{G}_{02}^{-1} = -i \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{1}{2m} \Delta_2 - U(x_2) + \mu, \quad (24)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Обычное кинетическое уравнение получается взятием в уравнениях (21) и (22) $(-+)$ компонент матриц G_{12} и составлением разности членов этих уравнений [18]:

$$\hat{L}_1 G_{12}^{-+} \equiv (\hat{G}_{02}^{-1} - \hat{G}_{01}^{-1}) G_{12}^{-+} = - \int (\Sigma_{13}^{--} G_{32}^{-+} + \Sigma_{13}^{-+} G_{32}^{++} + G_{13}^{-+} \Sigma_{32}^{++} + G_{13}^{--} \Sigma_{32}^{-+}) d^4 x_3. \quad (25)$$

Введем новые координаты:

$$t = \frac{t_1 + t_2}{2}, \quad \tau = t_1 - t_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Для оператора \hat{L}_1 получим

$$\hat{L}_1 = -i \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{m} \nabla_{\mathbf{R}} \nabla_{\boldsymbol{\rho}} \right) + U \left(\mathbf{R} + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2} \right) - U \left(\mathbf{R} - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2} \right). \quad (26)$$

В калибровке $U(\mathbf{r}_1) = -e\mathbf{F}\mathbf{r}_1$ разность последних слагаемых приводится к виду

$$U \left(\mathbf{R} + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2} \right) - U \left(\mathbf{R} - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2} \right) = -e\mathbf{F}\boldsymbol{\rho}. \quad (27)$$

Переходя к фурье-переменным и используя определение (ср. (1), $f(E, \mathbf{p}) = -(i/2\pi)G^{-+}(E, \mathbf{p}, \mathbf{R}, t)$)

$$G^{-+}(E, \mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \int \exp(-i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho} + iE\tau) G^{-+} \left(\mathbf{R} + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, t + \frac{\tau}{2}, \mathbf{R} - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, t - \frac{\tau}{2} \right) d^3 \rho d\tau, \quad (28)$$

получим после стандартных преобразований [18]:

$$-i \left(\frac{\partial G^{-+}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial G^{-+}}{\partial \mathbf{R}} \right) + ie\mathbf{F} \frac{\partial G^{-+}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_1 G^{-+}. \quad (29)$$

В (29) интеграл соударений St_1 после фурье-преобразования и с использованием приближения квазиклассичности (ср. [18]) сводится к виду:

$$\text{St}_1 G^{-+} = -\Sigma^{-+} G^{+-} + \Sigma^{+-} G^{-+}. \quad (30)$$

Массовые операторы типа Σ^{+-} и Σ^{-+} изображены на рис. 1 и 2. В стандартной кинетической теории уравнение для функции распределения частиц по импульсам получается интегрированием уравнения (29) по энергии

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = -\frac{i}{2\pi} \int G^{-+} dE. \quad (31)$$

Здесь мы не будем интегрировать по энергии, поскольку наша задача состоит в том, чтобы получить кинетическое уравнение для обобщенной функции распределения, зависящей от энергии и импульса одновременно.

Отметим, что если $eF\lambda \ll \varepsilon_p$, где λ — длина волны де-Бройля, то запаздывающие (G^R) и опережающие (G^A) функции Грина можно считать не зависящими от величины электрического поля F . Если плотность электронов мала и можно пренебречь их вырождением, то для функции Грина G^{+-} можно использовать приближение

$$G^{+-} = G^R - G^A = -2\pi i \delta_\gamma(E - \varepsilon_p). \quad (32)$$

Используя (29), (30), (32), явный вид диаграмм для Σ^{+-} и Σ^{-+} (типа рис. 1), а также считая, что для атомов, на которых рассеиваются электроны, функции распределения имеют вид (ср. (7)) $N_a(E, \mathbf{p}) = n(E)\delta(E - \varepsilon_p)$, получим кинетическое уравнение для обобщенной функции распределения электронов по энергиям и импульсам $f(E, \mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = f$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)f - e\mathbf{F}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}\{f\}. \quad (33)$$

Линейный интеграл соударений с атомами, населенности которых на уровне с энергией E_i равны N_i , с учетом упругих и неупругих столкновений имеет вид

$$\begin{aligned} \text{St}\{f\} = \sum_{i,k} N_i \int d^3q |V_{ik}(\mathbf{q})|^2 \{ \delta_\gamma(E - \varepsilon_p) f(E + E_{ki}, \mathbf{p} - \mathbf{q}) - \\ - \delta_\gamma(E - E_{ki} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) f(E, \mathbf{p}) \}. \end{aligned} \quad (34)$$

В данном модельном примере для ширины γ , входящей в определение δ_γ -функции (13), можно написать нелинейное интегральное уравнение (ср. [20]) с учетом только упругого рассеяния:

$$\gamma = 4\pi^2 \int \frac{d^3p' d^3q}{(2\pi)^6} |V_{\mathbf{q}}|^2 \delta_\gamma(E + \varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}) N_a(\mathbf{p}'). \quad (35)$$

В простейшем приближении для оценки γ можно использовать выражение для частоты транспортных соударений электронов с нейтралами. Из (33), (34) видно, что замкнутое уравнение для функции распределения по импульсам может быть получено интегрированием этих уравнений по энергии, только если заменить δ_γ -функции их пределом при $\gamma \rightarrow 0$.

Поскольку именно учет уширения в данном случае приводит к степенным распределениям по импульсам и всем указанным выше эффектам существенного возрастания скоростей пороговых процессов в плотных средах, при исследовании вопроса об эффектах неравновесности следует работать с приведенным выше кинетическим уравнением (33), считая E и \mathbf{p} независимыми переменными. В рамках подхода [6] эти эффекты полностью пропадают. Отметим, что с той же точностью, с какой кинетическое уравнение (33) получалось с помощью образования разности уравнений (21) и (22), обобщенная функция распределения должна удовлетворять уравнению, получаемому суммированием этих же уравнений (21) и (22). Опуская подробности вывода, приведем это уравнение в следующем виде:

$$\left\{ 2(E - \varepsilon_p) - \Sigma^R - \Sigma^A - 2\mu + \frac{1}{4m} \Delta_R - 2e\mathbf{F}\mathbf{R} \right\} G^{-+} = -\Sigma^{-+} \frac{\{2(E - \varepsilon_p) - \Sigma^R - \Sigma^A - 2\mu\}}{|E - \varepsilon_p - \Sigma^R|^2}. \quad (36)$$

Величина $\Sigma^R + \Sigma^A = 2 \text{Re} \Sigma^R$ соответствует удвоенному плотностному сдвигу кинетической энергии, приводящему к механизму снижения потенциала ионизации. Величина

$$\Sigma^{-+} = - \sum_{i,k} N_i \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |V_{ik}(\mathbf{q})|^2 \delta_\gamma(E - \varepsilon_p) f(E + E_{ki}, \mathbf{p} - \mathbf{q})$$

соответствует члену, описывающему приход в правой части уравнения (34). Отметим, что в однородном равновесном случае в отсутствие внешних полей из (36) для G^{-+} следует

$$G^{-+} = - \frac{\Sigma^{-+}}{\Sigma^{-+} - \Sigma^{+-}} (G^R - G^A). \quad (37)$$

Можно показать, что это выражение в точности эквивалентно соотношению (2). Для решения неоднородных задач о распределении электронов по энергиям и импульсам в электрическом поле необходимо решать совместно уравнения (33), (36). Аналогичная процедура использовалась в работе [13] для обобщенной интенсивности излучения $J(\omega, \mathbf{k})$, где приведены примеры совместного использования кинетического и волнового уравнений (аналоги (33), (36)), которым удовлетворяет $J(\omega, \mathbf{k})$, для решения задач о выходе излучения из конечного объема.

В общем случае решение уравнений (33), (34), (36) возможно только численно, так же, как и нахождение функции распределения электронов по энергиям в стандартной постановке. Мы не будем здесь останавливаться на более подробном анализе полученных кинетических уравнений. Отметим, что численное решение уравнений Каданова–Бейма, к которым относятся и уравнения (33), в настоящее время является предметом исследования при описании кинетики электронов в полупроводниках [26].

В заключение сформулируем основные результаты данной работы. Показано, что в плотных средах учет частых соударений, нарушающих однозначную связь между энергией и импульсом частицы и приводящих к существованию равновесных степенных хвостов в функции распределения частиц по импульсам, может существенно увеличить константы скоростей реакций, идущих с заметным энергетическим порогом. Температурная зависимость таких констант может быть неэкспоненциальной и зависеть степенным образом от плотности. Такая неаррениусовская зависимость скоростей процессов может проявляться в химии высоких давлений, пробое жидких диэлектриков, ускоренной $V - T$ -релаксации в плотных молекулярных газах и в возникновении жестких излучений при относительно низких температурах и больших плотностях плазмы.

Для ориентации можно указать условия, когда эффекты, связанные с квантовой неопределенностью энергии, из-за столкновений должны иметь место и проявляться в указанных выше процессах. Критерий $\hbar\gamma \propto T$ выполняется для комнатной температуры при давлениях газа $\sim 10^3$ атм. Реально заметное ускорение процесса по сравнению с классической экспоненциальной аппроксимацией имеет место, как следует из (20), если $\hbar\gamma/I \gg \exp(-I/T)$, что выполняется при $\hbar\gamma \ll \min(T, I)$, т. е. при гораздо меньших давлениях. Условия в неидеальной плазме, при которых эффекты степенных хвостов сильно влияют на скорости возбуждения и ионизации атомов и ионов, соответствуют критериям $\Gamma \sim 1$, $\lambda/r_D \sim 1$ и частично представлены на рис. 3 и 4.

При экспериментальной проверке указанных эффектов следует обращать внимание на то, что описанные здесь явления должны происходить в равновесных условиях и не быть связаны с наличием группы быстрых частиц, возникающих за счет ускорительных механизмов в неустойчивой плазме.

Авторы выражают глубокую благодарность В. Ю. Баранову, П. Д. Гаспаряну, А. М. Дыхне, Ю. М. Кагану, Н. Г. Ковальскому, А. Г. Леонову, А. А. Пантелееву, В. Д. Письменному, Л. П. Феокистову, В. Е. Фортову и В. Д. Шафранову за интерес к работе и полезную критику.

Работа выполнена при частичной поддержке Международного научно-технического центра (проект № 076-95).

Литература

1. M. Schlanges, Th. Bornath, and D. Kremp, *Phys. Rev. A* **38**, 2174 (1988).
2. Th. Bornath, M. Schlanges, and D. Kremp, *Contrib. Plasma Phys.* **28**, 57 (1988).
3. Yu. L. Klimontovich, M. Schlanges, and Th. Bornath, *Contrib. Plasma Phys.* **30**, 349 (1990).
4. M. Schlanges, Th. Bornath, and D. Kremp, in *Physics of Nonideal Plasmas*, ed. by W. Ebeling, A. Forster, and R. Radtke, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart-Leipzig (1992), p. 154.
5. U. Leonhardt, in *Physics of Nonideal Plasmas*, ed. by W. Ebeling, A. Forster and, R. Radtke, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart-Leipzig (1992), p. 162.
6. D. Kremp, K. Morawetz, M. Schlanges et al., *Phys. Rev. E* **47**, 635 (1993).
7. V. M. Atrazhev, I. T. Iakubov, and V. I. Roldughin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **9**, 1735 (1976).
8. А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Электроны в плотных газах и плазме*, Наука, Москва (1981).
9. Y. Sakai, in *Linking the Gaseous and Condensed Phases of Matter. The Behavior of Slow Electrons*, ed. by L. G. Christophorou, E. Illenberger, and W. F. Schmidt. NATO ASI Series. Ser. B: Physics, Plenum, New York (1994), vol. 326, p. 303.
10. L. G. Christophorou and K. Siomos, in *Electron-Molecule Interactions and Their Applications*, ed. by L. G. Christophorou, Academic Press, New York (1984), vol. 1, p. 477.
11. В. Д. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг и др., *Квантовая статистика систем заряженных частиц*, Мир, Москва (1988).
12. Л. Каданов, Г. Бейм, *Квантовая статистическая механика*, Мир, Москва (1964).
13. Ю. К. Земцов, А. Ю. Сечин, А. Н. Старостин, *ЖЭТФ* **110**, 1654 (1996).
14. В. М. Галицкий, В. В. Якимец, *ЖЭТФ* **51**, 957 (1966).
15. Ю. К. Земцов, А. Ю. Сечин, А. Н. Старостин и др., *Письма в ЖЭТФ* **65**, 15 (1997).
16. Ю. К. Земцов, А. Ю. Сечин, А. Н. Старостин и др., *Письма в ЖЭТФ* **65**, 807 (1997).
17. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
18. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
19. И. Б. Левинсон, *ЖЭТФ* **75**, 234 (1978).
20. Ю. К. Земцов, А. Н. Старостин, *ЖЭТФ* **103**, 345 (1993).
21. В. М. Галицкий, *Избранные труды. Исследования по теоретической физике*, Наука, Москва (1983).
22. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
24. Н. Л. Александров, Э. Е. Сон, в сб. *Химия плазмы*, под ред. Б. М. Смирнова, Атомиздат, Москва (1980), вып. 7, с. 35.
25. Л. Хаксли, Р. Кромптон, *Диффузия и дрейф электронов в газах*, Мир, Москва (1977).
26. M. Bonitz and D. Kremp, in *Proc. Int. Conf. on Strongly Coupled Coulomb Systems*, Boston College, Boston (1997).