ПРОВОДИМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ И КУЛОНОВСКИЙ ЛОГАРИФМ

А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин*

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 21 апреля 2022 г., после переработки 09 июня 2022 г. Принята к публикации 13 июня 2022 г.

На основе предложенной методики выполнена обработка экспериментальных данных, полученных в разное время для проводимости неидеальной плазмы инертных газов. Однозначно выявить характерные эффекты неидеальности по результатам обработки не удалось. На основе извлеченного из эксперимента кулоновского логарифма выполнен анализ его поведения в области развитой кулоновской неидеальности. Предложено расчетное выражение для кулоновского логарифма. Указано на недостаточную точность методики измерений плазменных параметров в рассмотренных экспериментах.

DOI: 10.31857/S0044451022110190 **EDN:** LBGZCN

1. ВВЕДЕНИЕ

В 60-е годы широким фронтом развернулись исследования различных свойств неидеальной плазмы, в том числе и проводимости. Сформировалось направление «Физика неидеальной плазмы». К настоящему времени опубликовано несколько монографий (см., например, [1–5]), в которых приводятся основные экспериментальные и теоретические работы, выполненные в этой области, что позволяет нам не рассматривать подробно итоги этой работы.

Практически все 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 рассматривались эффекты неидеальности, связанные с взаимодействием между зарядами. Однако получить полностью ионизованную плазму с развитой кулоновской неидеальностью сразу, да и впоследствии оказалось непросто. Измеряли проводимость плазмы частично ионизованной. «Извлекаемая» из нее проводимость «полностью ионизованной» плазмы содержала неконтролируемые погрешности, связанные с рядом факторов: неаддитивностью сопротивлений атомарной и заряженной компонент, отсутствием общепринятой методики расчета состава атомарной плазмы и «кулоновского логарифма» и т. д. Тем не менее «кулоновская» составляющая проводимости тем или иным способом оценивалась и сравнивалась с имеющимися аналитическими результатами [6–8]. С результатами обработки ранних экспериментов можно ознакомиться в работе [9]. Мы ограничимся одним единственным выводом — установить ярко выраженные эффекты неидеальности при сравнении теории с экспериментом не удалось, кроме одного — проводимость была конечной.

Процедура извлечения кулоновской составляющей проводимости совершенствовалась, к тому же были проведены дополнительные серии экспериментов [10] по измерению проводимости плазмы инертных газов. В работе [11] для извлечения кулоновской составляющей проводимости была использована более точная и сложная методика, в основе которой лежал расчет полной проводимости. Ожидаемого согласия с экспериментом получено не было, чем и объясняется, на наш взгляд, учет достаточно экзотических эффектов при расчете. Была использована модель, названная [12] моделью Лоренца– Блоха. Эта плазменная модель была построена на основе соотношений, предложенных еще в [13] для расчета проводимости полупроводников, и развита

^{*} E-mail: shum_ac@mail.ru

в работе [14] для использования в плазме экстремально высоких параметров, почти твердотельных. В плазменной модели [14] было учтено вырождение термически ионизованных электронов проводимости, возможность образования ионной решетки. Частота столкновений электронов проводимости с ионной решеткой в целом рассчитывалась в борновском приближении (фактически по Займану [15]), что позволяло учесть эффекты появления ее структуры. В расчетных формулах появлялся структурный фактор ионной решетки и специфический кулоновский логарифм. Согласие с экспериментом достигалось коррекцией «кулоновской составляющей» полной проводимости.

Авторы работы [16] также выполнили расчет проводимости плазмы инертных газов, используя исчерпывающий набор вариантов расчета кулоновского логарифма. Достигнуть согласия с экспериментальными данными [10], на наш взгляд, так и не удалось. Заметим также, что по данным самих авторов работы [11] эффектов сильного вырождения для большинства экспериментальных точек не наблюдалось. Параметр вырождения ϑ , равный отношению температуры к энергии Ферми, был везде заметно больше единицы. Да и проявления ионной структуры было весьма слабым, поскольку маделунговский параметр неидеальности Γ_i был заметно меньше единицы для большинства точек:

$$\Gamma_i = \frac{\beta q^2}{R_i},\tag{1}$$

где $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура, q — заряд электрона, $R_i = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ — радиус ячейки Вигнера–Зейтца, n_i — концентрация ионов. В работе [9] используется другой параметр неидеальности:

$$\Gamma = \frac{\beta q^2}{R_D},\tag{2}$$

где

$$R_D = 1/\sqrt{4\pi\beta q^2(n_e + n_i)}.$$
 (3)

Между параметрами неидеальности есть связь: $\Gamma_i^3 = 6\Gamma^2$.

Мы решили вновь обратиться к рассмотрению данных экспериментов [9,10] в инертных газах, приняв во внимание ряд новых факторов, а также несколько изменив методику расчета полной проводимости.

Действительно, в последнее время опубликованы результаты нескольких серий численных *ab initio* экспериментов [17, 18], где методом молекулярной динамики рассчитывалась проводимость полностью ионизованной неидеальной плазмы. При обработке экспериментов в работах [10, 11, 16] эти данные не рассматривались. Не учитывались и работы, связанные с прямым решением уравнения Больцмана для полностью ионизованной неидеальной плазмы [19, 20].

В настоящей работе мы рассмотрим проблему расчета проводимости частично ионизованной неидеальной плазмы инертных газов, сформулировав достаточно простую, но единую методику расчета уравнения состояния, состава, проводимости и обработки исходных экспериментальных данных. Единственной неопределенной величиной, извлекаемой из эксперимента, будем считать величину кулоновского логарифма. Именно здесь следует ожидать наиболее яркие эффекты кулоновской неидеальности. В результате исследования хотелось бы понять, с чем связаны наблюдаемые отклонения от теории, — с ее несовершенством или с трудностями измерений и диагностики неидеальной плазмы, получаемой в ударно-волновых экспериментах.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА, УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И СОСТАВ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Рассмотрим систему, состоящую из N_a атомов, N_e электронов и N_i ионов, находящихся в объеме V, при температуре T. Будем считать газ свободных электронов невырожденным ($\vartheta > 1$) с максвеловской функцией распределения. Свободная энергия неидеальной смеси атомов, электронов и ионов в аддитивном приближении запишем в виде суммы свободных энергий атомарной и заряженной компонент:

$$F = F_a + F_{ch},\tag{4}$$

где

$$F_a = -N_a k_B T \ln\left(\frac{eVg_a \exp\left(\beta I\right)}{N_a \lambda_a^3}\right) + N_a k_B T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, (5)$$
$$F_{ch} = -N_e k_B T \ln\left(\frac{eVg_e}{N_e \lambda_e^3}\right) - N_i k_B T \ln\left(\frac{eVg_i}{N_i \lambda_i^3}\right) - (N_e + N_i)\Delta f_{ei}.(6)$$

В выражениях (5), (6) λ_e , λ_i и λ_a — соответственно тепловые длины волн электрона, иона и атома, g_e , g_i и g_a — статистические веса электрона, иона и атома, η — параметр упаковки, I — потенциал ионизации атома.

Перекрестные слагаемые, связанные с взаимодействием атом-заряд, в первом приближении мы не учитываем (их учет выполнен в работе [21]), поскольку область, где одновременно высоки концентрации атомов и зарядов, в рассматриваемых нами условиях невелика.

В термодинамике нами учтены два вида неидеальности: исключенный объем в приближении Карнахана–Старлинга (второе слагаемое в (5)) для атомарной компоненты и кулоновское взаимодействие между разноименными зарядами в приближении ближайшего соседа [22] (третье слагаемое в (6)) для заряженной компоненты:

$$\Delta f_{ei} = \frac{3}{4} \frac{q^2}{R_i}.\tag{7}$$

Наша практика показала [23], что этого вполне достаточно для плазмы инертных газов в рассматриваемых условиях, при расчетах с процентной точностью.

Равновесный состав газоплазменной смеси определяется из решения уравнений баланса, главным из которых является связь химических потенциалов атомов μ_a , электронов μ_e и ионов μ_i в реакции ионизации:

$$\mu_a = \mu_e + \mu_i. \tag{8}$$

Безразмерные ($\beta = 1/k_BT$) химические потенциалы определяются из свободной энергии $\beta \mu_{a,e,i} = \partial \beta F / \partial N_{a,e,i}$ и соответственно равны

$$\beta \mu_a = -\ln\left(\frac{Vg_a}{N_a \lambda_a^3}\right) + HS(\eta),\tag{9}$$

$$\beta \mu_{e,i} = -\ln\left(\frac{Vg_{e,i}}{N_{e,i}\lambda_{e,i}^3}\right) - \frac{\beta q^2}{R_i},\tag{10}$$

$$HS(\eta) = \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1-\eta)^3}.$$
 (11)

Вводя степень термической ионизации $\alpha = n_{(e,i)}/n$, получим из (8) уравнение ионизационного равновесия — формулу Саха:

$$\frac{1-\alpha}{\alpha^2} = n\lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp\left(\beta I - \frac{\beta q^2}{R_i} - HS(\eta)\right).$$
(12)

Формулу Саха необходимо дополнить уравнениями электронейтральности и баланса:

$$n_e = n_i, \tag{13}$$

$$n = n_a + n_i. \tag{14}$$

Уравнения (12) и (13), (14) полностью определяют состав газоплазменной смеси, а решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n,T)$. Наша методика дает результаты, весьма близкие к данным

расчетов по коду SAHA IV [9,11], что подтверждается сопоставлением результатов расчета состава существенной величиной при расчете проводимости. На рис. 1 и 2 нанесены безразмерные величины n_e/n , n_a/n в зависимости от плотности. Для плазмы аргона и ксенона различия в расчетах не превосходят 5 % для аргона и 5–10 % для ксенона (см. рис. 2). Для аргона температура в этих расчетах соответствует 17000–20000 К, для ксенона T = 25000-30000 К. Поскольку, как будет видно из дальнейшего, речь идет об отклонениях теории и эксперимента в десятки процентов, в уточнении термодинамической модели нет необходимости.

3. ПРОВОДИМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

По оценкам самих авторов работы [11] и нашим расчетам роль эффектов вырождения и роль структуры ионной решетки не велики. Для расчета проводимости мы воспользуемся хорошо зарекомендовавшей себя [23] интерполяционной формулой Фроста. Ее точность была установлена путем сравнения с результатами расчетов, полученных на основе прямого решения уравнения Больцмана [24] для частично ионизованной плазмы инертных газов. Установленная погрешность расчетов по формуле Фроста по сравнению с расчетами на основе уравнения Больцмана не превышала 10 %, что можно считать вполне достаточной для реализации целей настоящей работы. Надо отметить, что и формула Лоренца-Блоха [12] и формула Фроста не являются точными соотношениями, а построены с использованием т-приближения для интеграла столкновений [7]. В этом приближении вместо транспортного сечения, возникающего естественным образом в модели Лоренца [7], используется некое эффективное время между столкновениями $\tau(E)$, что позволяет существенно упростить интеграл столкновений [7]:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{f - f_0}{\tau(E)}.$$
(15)

Для проводимости сразу имеем:

$$\sigma_{\tau} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{q^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty e^{-E/T} E^{3/2} \tau(E) dE, \qquad (16)$$

где q, m_e и E — заряд, масса и энергия электрона проводимости. С формальной точки зрения, выбор $\tau(E)$ произволен. Наличие точных соотношений для полностью ионизованной и слабоионизованной



Рис. 1. Состав плазмы паров Ar. Наш расчет: штриховая кривая с кружками — концентрация электронов (n_e/n) ; штриховая кривая с треугольниками — концентрация атомов (n_a/n) . Saha IV [9]: пустые ромбы — концентрация электронов; пустые треугольники — концентрация атомов



Рис. 2. Состав плазмы паров Хе. Наш расчет: штриховая кривая с кружками — концентрация электронов (n_e/n) , штриховая кривая с треугольниками — концентрация атомов (n_a/n) . Saha IV [9]: пустые ромбы — концентрация электронов, пустые треугольники — концентрация атомов

плазмы позволило Фросту [25] предложить интерполяционную формулу, носящую его имя.

Формула Фроста строится с использованием au-приближения с временем пробега au_F :

$$\tau_F = \frac{1}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}.$$
(17)

В частоту столкновений, которая определяет величину τ_F , введен множитель $\gamma_S = 0.582$, полученный Спитцером для полностью ионизованной плаз-

мы и учитывающий межэлектронные столкновения. Именно поэтому формула Фроста дает близкие к точным результатам значения для полностью и слабоионизованной плазмы:

$$\sigma_F = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{q^2 n_e}{m_e T^{5/2}} \int_0^\infty \frac{e^{-E/T} E^{3/2} dE}{\nu_{ea} + \gamma_S^{-1} \nu_{ei}(E, \Gamma)}.$$
 (18)

Для последующей обработки экспериментальных данных мы запишем частоту столкновений электронов проводимости с ионами в виде

$$\nu_{e,i}(E,\Gamma) = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \Big(4\pi n_i \Big(\frac{q^2}{2E}\Big)^2 A(\Gamma) \Big), \qquad (19)$$

где $A(\Gamma)$ — искомый нами (на основе обработки экспериментов) кулоновский логарифм — величина, вокруг которой идут основные дискуссии.

Качественно, кулоновский логарифм определяется как логарифм отношения максимального прицельного параметра рассеяния к минимальному. Можно говорить, что его величина надежно установлена лишь при его больших значениях в случае плазмы термоядерных условий. Простейший вариант кулоновского логарифма $\ln(1/\Gamma)$ мы находим у Спитцера [6] и Ландау [26]. Возможны и иные варианты, $\ln(1 + a/\Gamma)$. В литературе можно найти десяток «формул» для кулоновского логарифма, так что предмет поиска присутствует.

Для расчета частоты столкновений электронов с атомами инертных газов воспользуемся весьма точными (точность 6–9 % для Ar, Xe) аппроксимационными формулами, предложенными в работах [27,28]:

$$\sigma_{ea}(\epsilon) = \sum_{i} \frac{A_i + B_i \epsilon^{C_i}}{1 + D_i \epsilon^{E_i}},\tag{20}$$

где $\epsilon = E/I$, I — потенциал ионизации атома инертного газа; A_i , B_i , C_i , D_i , E_i — коэффициенты аппроксимации, приведенные в [27,28].

4. МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Разобьем всю совокупность экспериментальных данных на две группы: группа 1 — «ранние» [9] эксперименты и группа 2 — «новые» [10, 11] эксперименты. Такое разделение обусловлено прогрессом в уровне диагностики и обработки экспериментальных данных, полученных в рассматриваемых экспериментах в разное время.



Рис. 3. Обратный кулоновский логарифм. Теория: $1 - \ln(1/\Gamma)$; $2 - \ln(3\sqrt{2}/\Gamma)$; $3 - \ln(1 + 3\sqrt{2}/\Gamma)$; 4— решение уравнения Больцмана для потенциала Muffin tin [19]; 5 — решение уравнения Больцмана для экранированного потенциала [20]. Результаты *ab initio* расчетов: 6— [17]; 7 — [18]. Эксперимент [9]: 8 — Ar; 9 — Xe



Рис. 4. Обратный кулоновский логарифм. Теория: $1 - \ln(3\sqrt{2}/\Gamma); 2 - \ln(1 + 3\sqrt{2}/\Gamma); 3$ — решение уравнения Больцмана для потенциала Muffin tin [19]; 4 — решение уравнения Больцмана для экранированного потенциала [20]. Эксперимент [10, 11]: 5 — Аг; 6 — Хе

В таблице приводятся диапазоны параметров, при которых выполнены эксперименты [9,11]. Данные двух групп экспериментов различаются диапазонами давлений и температур. Для [9] это $T \sim (20 30) \cdot 10^3$ К и $P \sim 300-2000$ бар. Для [11] диапазон несколько иной: $T \sim (6.5-18.3) \cdot 10^3$ К и $P \sim 392-$ 6500 бар. Важными являются диапазоны параметров неидеальности и вырождения. Видно, что эф-

Таблица 1.

Группа	Р, бар	$T, \kappa K$	Γ_i	Г	θ
1 - [9]	300-2000	20-30	_	0.5 - 4.5	_
2 - [10, 11]	400-6500	6.5 - 18.3	0.05 - 1	—	$10^{4}-10$

фекты вырождения в первом приближении можно не учитывать. Эксперименты [1] по измерению уравнения состояния плазмы инертных газов в рассматриваемом диапазоне параметров неидеальности не показали наличия существенных эффектов, требующих учета при расчете состава. Пробные расчеты состава (см. рис. 1, 2) по нашей модели (4)–(6) с процентной точностью совпадают с расчетами по коду SAHA IV, приведенными в [11].

Процедура обработки экспериментальных данных заключалась в следующем. Для каждой экспериментальной точки по заданной плотности и температуре рассчитывался состав и полная проводимость по формуле (18). Далее находилась величина A, при которой расчет совпадал с экспериментом. На рисунках откладывалась величина 1/A при соответствующем параметре неидеальности Г. При обработке результатов численных *ab initio* расчетов рассчитанное значение проводимости σ_c делилось на величину σ_0 , и на рисунке откладывалась величина $1/A = \sigma_c/\sigma_0$, где

$$\sigma_0[\mathbf{c}^{-1}] = 0.591 \frac{(k_B T)^{3/2}}{\sqrt{m_e} q^2}.$$
 (21)

На рис. 3 представлены результаты обработки, которые можно назвать искомой величиной кулоновского логарифма. При $\Gamma < 1$ результаты теории и всех теоретических расчетов практически совпадают. При $\Gamma > 1$ результаты эксперимента лежат ближе к расчету по варианту 2 и не совпадают с решениями уравнения Больцмана и с *ab initio* расчетами [18], но неплохо совпадают с данными работы [17]. Однако результаты [17] при $\Gamma > 1$ лежат вне границ применимости использованной при расчетах модели «с полочкой». При $\Gamma = 3\sqrt{2}$ расходимость кулоновского логарифма отсутствует и имеется согласие [18] с результатами решений уравнения Больцмана [19, 20].

На рис. 4 представлены данные по обработке экспериментов [10,11]. Ситуация при $\Gamma > 1$ немного изменилась. Экспериментальные точки заметно приблизились к данным работ [19,20], но обращает на себя внимание группа точек при $\Gamma < 1$. Их отклонения от теории, причем с разных сторон, однозначно говорят о недостаточной точности эксперимента. Ярких эффектов неидеальности в этой серии также не наблюдается.

Мы в своих расчетах проводимости плазмы паров металлов и инертных газов пользовались и продолжаем пользоваться вариантом под номером *3* (см. рис. 3):

$$A = \ln\left(1 + \frac{3\sqrt{2}}{\Gamma}\right). \tag{22}$$

Этот вариант при $\Gamma > 1$ проходит между результатами численного моделирования [17,18] и близок к результатам, полученным при решении уравнения Больцмана, что позволяет нам рекомендовать его для расчетов в области $\Gamma < 3$, что вполне достаточно «для пользователей».

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена обработка экспериментальных данных, полученных в разное время для проводимости неидеальной плазмы инертных газов с использованием новой методики. По результатам обработки не удалось однозначно выявить эффекты неидеальности. Установленное поведение кулоновского логарифма показывает его регулярность, но не позволяет однозначно выявить его функциональную зависимость от параметра неидеальности. Скорее всего это обусловлено трудностями измерения и диагностики в эксперименте, а не недостатками теории.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

ЛИТЕРАТУРА

- В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, Физика неидеальной плазмы, Физматлит, Москва (2010).
- В. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Репке, Квантовая статистика систем заряженных частиц, Мир, Москва (1988).
- W. Ebeling, W. D. Kraeft, and D. Kremp, Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids, Akademie-Verlag, Berlin (1976).
- П. П. Кулик, В. А. Рябый, Н. В. Ермохин, *Heude*альная плазма, Энергоатомиздат, Москва (1984).
- Л. П. Кудрин, Статистическая физика плазмы, Атомиздат, Москва (1974).

- Л. Спитцер, Физика полностью ионизованного газа, под ред. М. Л. Левина, Мир, Москва (1965).
- Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Физическая кинетика, Наука, Москва (1979).
- H. A. Gould and H. E. De Witt, Phys. Rev. 155, 68 (1967).
- В. Ю. Иванов, В. Б. Минцев, В. Е. Фортов, А. Н. Дремин, ЖЭТФ 71, 216 (1976).
- Н. С. Шилкин, С. В. Дудин, В. К. Грязнов и др., ЖЭТФ 124, 1030 (2003).
- J. R. Adams, N. S. Shilkin, V. E. Fortov et al., Phys. Plasmas 14, 062303 (2007).
- 12. В. К. Грязнов, Ю. В. Иванов, А. Н. Старостин, В. Е. Фортов, ТВТ 14, 643 (1976).
- **13**. Б. М. Аскеров, Электронные явления переноса в полупроводниках, Наука, Москва (1975).
- **14**. А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, А. В. Филиппов, Письма в ЖЭТФ **104**, 708 (2016).
- **15.** J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1972).
- А. В. Филиппов, А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, ЖЭТФ 153, 514 (2018).
- **17**. Г. Э. Норман, И. В. Морозов, ЖЭТФ **127**, 412 (2005).
- 18. A. A. Bobrov, A. M. Bunkov, S. Y. Bronin, A. B. Klyarfeld, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Plasmas 26, 082102 (2019).
- 19. И. А. Муленко, А. Л. Хомкин, ТВТ 29, 1234 (1991).
- Е. В. Заика, И. А. Муленко, А. Л. Хомкин, ТВТ 38, 5 (2000).
- 21. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ТВТ 52, 335 (2014).
- **22**. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, Вестник ОИВТ РАН **3**, 4 (2020).
- **23**. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, УФН **191**, 1187 (2021).
- **24**. Э. И. Асиновский, В. М. Батенин, ТВТ **6**, 966 (1968).
- 25. L. Frost, J. Appl. Phys. 32, 2029 (1961).
- 26. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 7, 203 (1937).
- R. I. Golyatina and S. A. Maiorov, Phys. Sci. Technol. 8, 4 (2021).
- 28. Р. И. Голятина, С. А. Майоров, Успехи прикладной физики 9, 298 (2021).