

**В.Е. Фортов**

---

---

**УРАВНЕНИЯ  
СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА**

**ОТ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА  
ДО КВАРК-ГЛЮОННОЙ ПЛАЗМЫ**



МОСКВА  
ФИЗМАТЛИТ®  
2013

Фортов В. Е. **Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 492 с. — ISBN 978-5-9221-1415-8.

В монографии представлен сравнительный анализ различных термодинамических моделей уравнений состояния. Рассмотрены основные идейные предпосылки теоретических методов и эксперимент. Основное внимание уделено описанию состояний, представляющих наибольший интерес для физики высоких плотностей энергии, которые либо уже получены, либо в обозримом будущем могут быть получены в контролируемых условиях на Земле, либо реализуются в астрофизических объектах на разных этапах их эволюции. Рассмотрены также ультраэкстремальные астрофизические и ядернофизические приложения, где на термодинамику вещества существенное влияние оказывают релятивизм, мощные гравитационные и магнитные поля, тепловое излучение, превращение ядерных частиц, нейтронизация нуклонов и деконфайнмент кварков.

Для широкого круга специалистов, занимающихся уравнениями состояния вещества и физикой высоких плотностей энергии, а также для студентов старших курсов и аспирантов.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	6
Введение . . . . .	9
Список литературы . . . . .	13
<b>Глава 1. Фазовые состояния вещества, их классификация . . . . .</b>	<b>15</b>
1.1. Электронная компонента . . . . .	15
1.2. Ядерная компонента . . . . .	24
1.3. Ядерные трансформации . . . . .	27
1.4. Ядерные трансформации и новые формы вещества . . . . .	30
1.5. Эксперимент и астрономические наблюдения . . . . .	35
Список литературы . . . . .	50
<b>Глава 2. Уравнения состояния газов и жидкостей . . . . .</b>	<b>57</b>
2.1. Вириальные разложения . . . . .	58
2.2. Ближний порядок. Интегральные уравнения . . . . .	59
2.3. Пылевая плазма для теории жидкостей . . . . .	73
Список литературы . . . . .	85
<b>Глава 3. Квантово-механические модели твердого тела . . . . .</b>	<b>89</b>
3.1. Приближения Хартри и Хартри-Фока . . . . .	89
3.2. Несферичность ячеек . . . . .	95
3.3. Псевдопотенциальные модели . . . . .	99
Список литературы . . . . .	101
<b>Глава 4. Термодинамика плазмы . . . . .</b>	<b>104</b>
4.1. Исторические замечания . . . . .	104
4.2. Иерархия моделей . . . . .	106
4.3. Химическая модель. Безразмерные параметры . . . . .	109
4.4. Физическая модель. Термодинамические соотношения . . . . .	116
4.5. Термодинамика неидеальной плазмы Солнца . . . . .	123
4.6. Модель ограниченного атома . . . . .	152
4.7. Термодинамические расчеты . . . . .	156
4.8. Термодинамика ударно сжатой плазмы мегабарного диапазона давлений. Неидеальность и вырождение . . . . .	167
4.9. Термодинамика газов. . . . .	175
4.10. Термодинамика водорода . . . . .	180
4.11. Термодинамика плазмы металлов . . . . .	184
Список литературы . . . . .	196

<b>Глава 5. Методы Монте–Карло и молекулярной динамики</b> . . . . .	209
5.1. Метод Монте–Карло. Псевдопотенциалы . . . . .	209
5.2. Квантовый метод Монте–Карло. Интегралы по траекториям . . . . .	211
5.3. Плазма H и H + He . . . . .	215
5.4. Ударная адиабата дейтерия . . . . .	223
5.5. Электронно-дырочная плазма полупроводников . . . . .	226
5.6. Кристаллизация дырок . . . . .	231
5.7. Электронно-дырочная плазма германия . . . . .	237
5.8. Квантовая молекулярная динамика . . . . .	238
5.9. Моделирование кварк-глюонной плазмы . . . . .	241
Список литературы . . . . .	250
<b>Глава 6. Статистическая модель вещества</b> . . . . .	256
6.1. О квантовомеханических расчетах многоэлектронных структур . . . . .	256
6.2. Статистическая модель . . . . .	263
6.3. Осцилляционные эффекты. . . . .	268
6.4. Квантовые и обменные поправки . . . . .	275
6.5. Применение МТФ к изолированному атому . . . . .	276
6.6. Уравнение состояния Томаса–Ферми . . . . .	279
6.7. Пределы применимости МТФ. Эксперимент. . . . .	283
Список литературы . . . . .	289
<b>Глава 7. Метод функционала плотности</b> . . . . .	295
7.1. Метод функционала плотности . . . . .	295
7.2. Атомные и молекулярные структуры . . . . .	300
7.3. Конденсированные среды. . . . .	304
Список литературы . . . . .	309
<b>Глава 8. Фазовые переходы</b> . . . . .	311
8.1. Плавление. . . . .	311
8.2. Полиморфные и электронные превращения . . . . .	320
8.3. Высокотемпературное кипение. . . . .	325
8.4. Плазменные фазовые переходы . . . . .	329
8.5. Неконгруэнтные фазовые переходы . . . . .	348
Список литературы . . . . .	358
<b>Глава 9. Полуэмпирические уравнения состояния</b> . . . . .	370
9.1. Квазигармоническое приближение . . . . .	371
9.2. Ангармонизм. Плавление решетки . . . . .	379
9.3. Термическое возбуждение электронов . . . . .	382
9.4. Испарение. Широкодиапазонные УРС . . . . .	384
9.5. Задача Ферми–Зельдовича. Построение термодинамически полного УРС по результатам динамических измерений . . . . .	389
Список литературы . . . . .	392

Глава 10. <b>Релятивистская плазма. Широкодиапазонное описание</b> . . . . .	397
10.1. Описание электронов . . . . .	398
10.2. Ионы . . . . .	400
10.3. Полностью ионизованная плазма . . . . .	401
10.4. Ионная жидкость. Однокомпонентная плазма . . . . .	403
10.5. Кулоновский кристалл . . . . .	406
Список литературы . . . . .	411
Глава 11. <b>Ядерные трансформации при сильных сжатиях</b> . . . . .	414
11.1. Экстремальные состояние нейтронных звезд . . . . .	416
11.2. Сжатие. Ядерные структуры . . . . .	425
11.3. Модель Томаса–Ферми . . . . .	427
11.4. Мезонная, пионная и каонная конденсации . . . . .	431
11.5. Нуклоны и гипероны при сверхсжатиях . . . . .	434
Список литературы . . . . .	446
Глава 12. <b>Кварк-глюонная плазма и странная материя</b> . . . . .	452
12.1. Деконфайнмент кварков и кварк-глюонная плазма . . . . .	452
12.2. Наблюдаемые проявления кварк-глюонной плазмы . . . . .	455
12.3. Аналогии между кварк-глюонной и электромагнитной плазмой . . . . .	464
12.4. Уравнение состояния кварк-глюонной плазмы . . . . .	468
12.5. Нейтронная кристаллизация и странная материя . . . . .	471
Список литературы . . . . .	474
Глава 13. <b>Полуэмпирические модели ядерного вещества</b> . . . . .	478
13.1. «Холодные» составляющие. . . . .	479
13.2. Температурные возбуждения . . . . .	480
13.3. Гидродинамика ядерных столкновений. . . . .	486
Список литературы . . . . .	489
Заключение. . . . .	491
Список литературы . . . . .	491

*Посвящаю моим родителям  
Галине Ивановне  
и Евгению Викторовичу*

## **Предисловие**

Настоящая монография написана по материалам лекций, которые в течение последних лет автор читал студентам Московского физико-технического института, а также на основе пленарных, обзорных и приглашенных докладов на научных конференциях и симпозиумах. Она отражает многолетний опыт работы в области уравнений состояния, физики экстремальных состояний, физической механики и строения вещества.

Уравнения состояния осуществляют в компактной математической форме отображение конкретных данных многих научных дисциплин на строгий математический язык. Количество работ по уравнениям состояния начиная с XVIII века огромно и постоянно растет, синхронно с поступлением новых научных данных. Этот прогресс, однако, не был плавным. Он резко усилился в середине XX века и был тесно связан с входением нашей цивилизации в атомную и космическую эры. Оптимальная работа ракетных двигателей и надежная теплозащита космических аппаратов связана с изучением и описанием горячей химически реагирующей плазмы сложного и постоянно меняющегося состава. В ядерных зарядах порождаемые мощными ударными волнами высокие плотности энергии используются для инициирования цепных ядерных реакций в сжатом ядерном топливе, а в термоядерных зарядах и в микромишениях управляемого термоядерного синтеза высокоэнергетические состояния — основной инструмент для сжатия, разогрева термоядерного топлива и инициирования в нем термоядерных реакций. Уравнения состояния вещества в этих экстремальных условиях составляют необходимый элемент проектирования и анализа работы этих устройств.

И хотя предельные давления лабораторной плазмы пока отличаются от максимальных астрофизических значений на 20–30 порядков, этот разрыв стремительно сокращается, а физические процессы в лаборатории и космосе часто демонстрируют поразительное разнообразие и, вместе с тем, глубокие аналогии, свидетельствуя, как минимум, о единстве физических принципов поведения вещества в широчайшем диапазоне плотностей (примерно 42 порядка) и температур (до  $10^{13}$  K).

Важно, что наряду с фундаментальными постоянно расширяется круг технических проблем, для решения которых необходимы совершенные уравнения состояния. Эти состояния вещества определяют работу импульсных термоядерных реакторов с инерционным удержанием горячей плазмы, мощных взрывомагнитных и магнетогидродинамических генераторов, энергоустановок и ракетных двигателей с газофазными ядерными реакторами, плазмохимических и СВЧ-реакторов, плазмотронов и мощных источников оптического

и рентгеновского излучения. В энергетических устройствах будущего сильно сжатая и разогретая плазма будет использоваться в качестве рабочего тела подобно водяному пару на современных тепловых электростанциях.

Экстремальные состояния возникают при воздействии на вещество мощных ударных, детонационных и электровзрывных волн, концентрированного лазерного излучения, электронных и ионных пучков, при мощных химических и ядерных взрывах, при импульсном испарении лайнеров пинчей и магнито-кумулятивных генераторов, при гиперзвуковом движении тел в плотных атмосферах планет, при высокоскоростном ударе и во многих иных ситуациях, характеризующихся предельно высокими давлениями и температурами. Физика приэлектродных, контактных и электровзрывных процессов при вакуумном пробое тесно связана с высокоэнергетической плазмой, определяющей также работу мощных импульсных ускорителей, генераторов СВЧ-излучений и плазменных коммутаторов.

Высокие плотности энергии определяют поведение вещества в обширной области фазовой диаграммы, занимая область от твердого тела и жидкости до нейтрального газа, покрывая фазовые границы плавления и кипения, а также область перехода металл–диэлектрик. Решение этих проблем современной физики высоких давлений и температур требует создания надежных и широкодиапазонных уравнений состояния конструкционных материалов во всех четырех агрегатных состояниях.

Наряду с прагматическим, сейчас обострился и общенаучный интерес к уравнениям состояния при высоких энергиях, так как подавляющая часть видимой материи во Вселенной находится именно в этом экзотическом состоянии. Ведь по современным оценкам около 95% массы (без учета «темной» материи) — это плазма обычных и нейтронных звезд, пульсаров, черных дыр и планет-гигантов Солнечной системы, а также открытых недавно сотен «экзопланет» — планет вне Солнечной системы.

Прежде чем стать звездой, вещество Вселенной проходит круги разнообразных физических превращений: от кварков и элементарных частиц к сложным молекулам и вновь к атомам и частицам, от релятивистских энергий к абсолютному нулю и вновь к состоянию высокоэнергетической и плотной плазмы, от гигантских плотностей к глубокому вакууму и снова к сверхвысоким плотностям атомного ядра и кваркам. Поэтому наши фундаментальные знания относительно структуры, эволюции и истории Вселенной напрямую зависят от понимания и корректного описания поведения материи при всех ее трансформациях вплоть до ультравысоких концентраций энергии, что формирует не только конкретные физические модели, но и мировоззренческие концепции современного естествознания.

Сегодня мы ясно видим, что изучение уравнения состояния вещества в экстремальных условиях является одной из наиболее «горячих» и интенсивно развивающихся фундаментальных научных дисциплин, находящихся на стыке физики плазмы, нелинейной оптики, конденсированного состояния, ядерной, атомной и молекулярной физики, релятивистской и магнитной гидродинамики с большим разнообразием стимулированных сжатием и разогревом физических эффектов и постоянно расширяющимся набором объектов и состояний, где межчастичное взаимодействие часто играет определяющую

роль. Несмотря на чрезвычайное разнообразие объектов, экспериментальных и астрофизических ситуаций, все они объединены определяющей ролью высоких плотностей энергии в их физическом поведении и необходимостью их описания термодинамически.

Эти обстоятельства являются постоянным устойчивым стимулом для интенсивных теоретических и экспериментальных исследований, в результате которых в последнее время получено большое количество новых, а главное, надежных сведений о термодинамических свойствах вещества в экстремальных условиях. Эти конкретные сведения содержатся в обширном потоке оригинальных публикаций, часть из которых малодоступна российским специалистам, особенно молодежи.

Автор старался систематизировать, обобщить и изложить с единой точки зрения теоретический и экспериментальный материал, относящийся к этой новой области науки, и, следуя Титу Лукрецию Кару, показать, что «Так из смешенья стихий бесконечные сонмы созданий Странных и многообразных на вид происходят» (*Тит Лукреций Кар. О природе вещей. В сер.: Великие мыслители. М.: Мир, 2006*).

В этой книге автор хотел обсудить возможно более широкий круг вопросов, именно уравнений состояния вещества. Поэтому многие интересные астрофизические, лазерные и ядерно-физические проблемы, а также технические приложения изложены кратко с отсылкой читателя к оригинальным работам и монографиям. При этом не ставилось целью включить все, что известно про уравнения состояния сегодня. Акцент сделан на те вопросы, которые представляются наиболее интересными автору и над которыми ему пришлось работать непосредственно. Понимая, что, ввиду исключительно быстрого развития науки по уравнениям состояния, затронутый в этой книге материал будет постоянно расширяться и уточняться, неизбежно устаревать, буду благодарен читателям, которые пришлют критические замечания и пожелания.

Надеюсь, что книга окажется полезной широкому кругу ученых, аспирантов и студентов естественно-научных специальностей, открывая им доступ к оригинальным работам и позволяя ориентироваться в увлекательных проблемах современных уравнений состояния.

В подготовке книги я пользовался помощью, стимулирующими дискуссиями и советами В. К. Грязнова, И. Л. Иосилевского, М. Б. Козинцовой, П. Р. Левашова, Е. Г. Максимова, А. Ю. Потехина, А. Н. Старостина, В. Г. Султанова, К. В. Хищенко, Г. В. Шпатаковской, Д. Г. Яковлева, В. А. Яковлевой, которым я искренне благодарен.

Абрамцево. Апрель 2011 г.

## Введение

Уравнение состояния — функциональная зависимость между параметрами, характеризующими состояние вещества, — является его основной количественной характеристикой, дающей возможность применения общего формального аппарата термодинамики и динамики сплошных сред (математической физики) к физическим объектам и процессам чрезвычайно разнообразной природы — от тепловых машин и биологических структур до ультраэкстремальных условий Большого взрыва и релятивистских адронных столкновений.

Законы сохранения являются отражением наиболее фундаментальных свойств симметрии пространства-времени (теорема Нётер); законы сохранения (массы, импульса и энергии) в максимально общем математическом виде отражают всю совокупность процессов в окружающей нас природе, в то время как уравнение состояния (УРС) вводит в этот общий формализм и конкретную количественную специфику именно данного (конкретного) состояния вещества — газа, жидкости, твердого тела, электромагнитной или кварк-глюонной плазмы, излучения ядерной материи — то есть всего разнообразия процессов и явлений окружающей нас природы. Поэтому интерес к УРС вещества всегда был достаточно высок не только с точки зрения многочисленных прагматических (технических и энергетических) приложений, но и с точки зрения понимания и описания процессов и явлений при экстремально высоких концентрациях энергии — стадиях большого взрыва, а также в астрофизических объектах (нейтронных звездах, черных дырах) на конечных стадиях их эволюции, когда под действием гравитационного сжатия и термоядерного энерговыделения реализуются ультравысокие давления и температуры ядерного вещества.

Таблица 0.1. Преобразование энергии.  $\mathbf{U} \sim \sqrt{T} \cdot \mathbf{p}$  — вектор Умова–Пойнтинга

ГЕНЕРАТОРЫ	$U$ , ат. ед.	$T$ , К	$p$ , бар	Рабочее тело
Цикл Ренкина — ПГУ	$10^3$	800	250	H <sub>2</sub> O
Цикл Ренкина + МГД	$10^4$	3 000	200	газ, уголь
Взрывные МГД генераторы	$10^5$	30 000	1 000	Ar, Xe
Магнитный термояд (ТОКАМАК)	$10^6$	$10^8$	100	DT
Взрывомагнитные генераторы	$10^8$	$10^4$	$10^6$	Металл
Термояд — Z пинч магнитный	$10^{10}$	$10^8$	$10^8$	DT
Инерционный термояд	$10^{14}$	$10^8$	$10^{10}$	DT

Передним краем науки в УРС всегда были описания состояния вещества в экстремальных условиях, так как именно с продвижением вверх по шкале

температур и давлений рабочих тел связано повышение эффективности тепловых машин, характеризующееся  $\text{div} \mathbf{U}$ , где  $\mathbf{U}$  — плотность потока энергии Умова–Пойтинга — табл. 0.1. Поэтому УРС рабочих тел тепловых машин является научной основой теплофизики высоких температур и идейной основой современной энергетики. Объем исследований и количество публикации здесь огромно, в интернете можно найти десятки тысяч ссылок на статьи, монографии, базы термодинамических данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ и тысячам соединений, особенно в области экстремально высоких давлений и температур.

В нашем обзоре мы не будем касаться этих обширных количественных исследований. А ограничимся только общими подходами термодинамического описания именно экстремальных на сегодняшний день состояний вещества в максимально широкой области фазовой диаграммы.

Поразительные успехи современной астрономии привели к громадному количеству качественно новой и главное надежной информации [1], полученной наземными средствами наблюдения и космическими автоматическими станциями. Это качественно изменило наши представления о структуре и эволюции широкого класса астрофизических объектов, типа нейтронных, странных (кварк-глюонных) звезд, черных дыр, где релятивистская электромагнитная и кварк-глюонная плазма вещества сжата до ультравысоких давлений гравитационными силами и разогрета термоядерным энерговыделением до температур в сотни миллиардов градусов [2, 3].

Описание структуры динамики и эволюции этих астрофизических объектов и Вселенной в целом требует построения новых весьма изощренных УРС ультраэкстремального состояния вещества, а с другой стороны — астрофизические данные являются бесплатным «экспериментальным» источником физической информации для построения моделей УРС в условиях далеко выходящих за пределы возможностей лабораторного эксперимента. По образному выражению академика Я. Б. Зельдовича «космос — это лаборатория для бедных». Ведь экспериментальное получение в лабораторных или квазилабораторных условиях экстремальных «космических» параметров потребовало бы совершенно нереальных экономических усилий [1].

Особое значение имеет разработка моделей УРС ранней Вселенной после Большого взрыва, где для описания начальных стадий реализуется наиболее экстремальные — «планковские» условия.

Появление современных мощных источников локальной концентрации энергии (лазеры, электронные, ионные потоки, ударные и сверхинтенсивные электромагнитные волны и т. п.) сделало объектом лабораторных исследований состояния вещества с недоступными ранее экстремально высокими давлениями и температурами, соответствующими новым областям фазовой диаграммы. Это существенно расширило круг специалистов, интересующихся физикой высоких концентрации энергии [2–4].

Вместе с тем, прогресс в численных методах на базе новых ЭВМ петафлопной и эксафлопной производительности привел к разработке эффективных разностных схем расчета нестационарных газодинамических явлений, что резко повысило требования к адекватному и детальному описанию термодинамических свойств вещества, так как точность газодинамических расчетов

определяется не только погрешностями в решении уравнений сохранения, а в первую очередь, — в уравнениях состояния среды, выполняющих роль «замыкающих» уравнений для полной системы уравнений движения.

Необходимость расчета термодинамических характеристик различных веществ возникает при решении практически любой задачи современной физики высоких плотностей энергии [2–4] — реализации идеи управляемого термоядерного синтеза, проектирования мощных магнетогидродинамических и магнитокумулятивных генераторов [2, 3], расчета динамики сильных ударных волн, противометеоритной защиты космических аппаратов, определения строения и эволюции звезд и планет. Все это наряду с задачами перспективной технологии высоких давлений (синтез алмазных фаз графита и нитрида бора, взрывная, электронно-лучевая и лазерная сварка и обработка металлов и т. п.) являются мощным стимулом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, имеющих целью как продвижение в область новых участков фазовой диаграммы, так и получение детальных данных в уже освоенном диапазоне параметров.

Масштабы реализуемых природой или человеком состояний вещества способны поразить самое смелое воображение. На дне Марианской впадины (11 км) давление воды достигает 1,2 кбар, в центре Земли — 3,6 Мбар,  $T \approx 0,5$  эВ, плотность  $\rho \approx 10\text{--}20$  г/см<sup>3</sup>; в центре Юпитера  $p \approx 40\text{--}60$  Мбар,  $\rho \approx 30$  г/см<sup>3</sup>,  $T \approx 2 \cdot 10^4$  К; в центре Солнца  $p \approx 240$  Гбар,  $T \approx 1,6 \cdot 10^3$  эВ,  $\rho \approx 150$  г/см<sup>3</sup>, в остывающих звездах — белых карликах  $p \approx 10^{10}\text{--}10^{16}$  Мбар,  $\rho \approx 10^6\text{--}10^9$  г/см<sup>3</sup>,  $T \approx 10^3$  эВ. В мишенях управляемого термоядерного синтеза с инерционным удержанием плазмы  $p \approx 200$  Гбар,  $\rho \approx 150\text{--}200$  г/см<sup>3</sup>,  $T \approx 10^8$  эВ. Нейтронные звезды, являющиеся элементами пульсаров, черных дыр,  $\gamma$ -всплесков и магнитаров, имеют по-видимому рекордно высокие параметры:  $p \approx 10^{19}$  Мбар,  $\rho \approx 10^{11}\text{--}10^{14}$  г/см<sup>3</sup>,  $T \approx 10^4$  эВ для мантии и для ядра:  $p \approx 10^{22}$  Мбар,  $\rho \approx 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>,  $T \approx 10^4$  эВ, при гигантской индукции магнитного поля, от  $10^{11}$  до  $10^{16}$  Гс. Изучение и описание этих экзотических состояний составляет предмет бурно развивающейся научной дисциплины — физики высоких плотностей энергии [2–4]. При этом под нижней границей «высоких плотностей энергии» обычно понимают плотности энергии, сравнимые с энергией связи конденсированного вещества  $10^4\text{--}10^5$  Дж/см<sup>3</sup>, что соответствует энергии связи валентных электронов в несколько электронвольт и давления примерно от 100 кбар до 1 Мбар. Эти давления значительно превосходят пределы механической прочности материалов и делают необходимым учет их сжимаемости и, следовательно, гидродинамического движения при импульсном энерговыделении.

Как мы уже отмечали, УРС вещества является «замыкающим» внешним уравнением по отношению к законам сохранения и строится либо по результатам экспериментов, либо методами статистической физики [5]. Основная трудность последовательного теоретического расчета УРС вещества методами статистической физики заключается в необходимости корректного учета сложного по структуре межчастичного взаимодействия в квантово-механической задаче многих тел при любых значениях константы связи и любом

типе статистики (несмотря на впечатляющие успехи современных беспараметрических методов молекулярной динамики Монте–Карло).

Поэтому при выполнении расчетов приходится рассматривать упрощенные модели, область применимости которых ограничена и устанавливается в каждом конкретном случае либо на основе внутренних характеристик модели, либо путем сравнения с более точными решениями или результатами эксперимента. Последний путь является, очевидно, более конструктивным, так как известны многочисленные примеры (теория Ван-дер-Ваальса, интегральные уравнения, неидеальная плазма и т. п.), когда фактическая область применимости моделей значительно превосходит границы, определяемые малостью соответствующих буквенных безразмерных численных параметров и критериев.

На следующем этапе развития термодинамических моделей имеющиеся экспериментальные данные привлекаются для выбора основных числовых параметров в функциональных зависимостях, построенных на основании точных решений или упрощенных моделей. Полученные таким образом полуэмпирические модели применяются для описания и формулировки адекватных моделей нулевого приближения в особо сложных ситуациях (жидкости, твердые тела, плотная электромагнитная и кварк-глюонная плазма, ядерная и нейтронная материя), не допускающих выделения малого параметра теории возмущений. Успех построения полуэмпирических моделей проверяется как качеством описания возможно более широкого числа разнородных экспериментальных данных, так и возможностью экстраполяции вычислений. Ясно, что для полуэмпирических моделей УРС эксперимент является не только необходимым дополнением, но и фактической основой их существования.

Наконец, значительная часть диаграммы состояний вещества, важная для практических приложений, недоступна в настоящее время ни для теоретических, ни для экспериментальных методов [2–4]. В этой ситуации существует почва для самых разнообразных гипотез, формулируемых обычно на языке эвристических моделей, которые представляют собой экстраполяцию в сильно неидеальную область результатов упрощенных, полученных для случая малых неидеальностей физических представлений. Являясь сугубо качественными, такие модели часто предсказывают появление новых фаз и состояний с экзотическими свойствами («плазменные» кристаллы и жидкости, плазменные фазовые переходы и фазовые переходы при деконфайнменте кварков, электрически заряженные фазы в нейтронных звездах, неконгруэнтные фазовые переходы и т. п.), что делает необходимым экспериментальную проверку этих интригующих возможностей.

Целью данной монографии является сравнительный анализ различных термодинамических моделей и обсуждение пределов их применимости в широком диапазоне параметров. Учитывая обширную термодинамическую литературу, мы рассмотрим лишь основные идейные предпосылки теоретических методик и очень кратко — эксперимент. Читателей, интересующихся деталями расчетов и исчерпывающей библиографией, мы отсылаем к специализированным обзорам и монографиям [1, 4, 6–29], посвященным подробному изучению свойств среды в конкретных областях фазовой диаграммы и рассчитанным на физиков соответствующей ориентации. Ввиду огромного числа

статей и книг по моделям уравнений состояния, ссылки в тексте даются преимущественно на работы последних лет, по которым можно ознакомиться и с историей вопроса. Основное внимание в прилагаемой монографии уделено описанию состояний, представляющих сейчас наибольший интерес для физики высоких концентраций энергии, которые либо уже получены, либо в обозримом будущем могут быть реализованы в контролируемых условиях на Земле, либо реализуются в астрофизических объектах на разных этапах их эволюции. Поэтому наряду с состояниями представляющими прагматический земной интерес, мы рассматриваем и ультрэкстремальные астрофизические и ядернофизические приложения, где на термодинамику вещества существенное влияние оказывают релятивизм, мощные гравитационные и магнитные поля, тепловое излучение, превращение ядерных частиц и нейтронизация нуклонов, деконфайнмент кварков и т. п. Ориентируясь на экстремальные физические условия, мы здесь не будем затрагивать прочностные эффекты в твердых телах ( $p = 10\text{--}100$  кбар) [2, 3, 30] и вопросы термодинамики сложных химических соединений. За рамками нашего рассмотрения останутся также детали экспериментальных методик — см. [2, 3] и содержащиеся там ссылки.

### Список литературы

1. Гинзбург В. О физике и астрофизике. — М.: Бюро Квантум, 1995.
2. Фортвов В. Е. Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
3. Фортвов В. Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
4. *Frontiers in High Energy Density Physics* / Ed. by D. Henderson. — Washington: National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, ч. 1. — М.: Наука, 1976.
6. Fortov V., Yakubov I., Khrapak A. *Physics of Strongly Coupled Plasma*. — Oxford: Clarendon Press, 2006.
7. Фортвов В., Храпак А., Якубов И. Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
8. Гинзбург В. О сверхпроводимости и сверхтекучести (что мне удалось, а что не удалось), а также о «физическом минимуме» на начало XXI века // УФН. — 2004. — Т. 174, № 11. — С. 1240.
9. Hemley R.J., Ashcroft N.W. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // *Physics Today*. — 1998. — V. 51, No. 8. — P. 26.
10. Засов А., Постнов К. Общая астрофизика. — Фрязино: Век-2, 2006.
11. Drake R. *High-Energy-Density Physics*. — Berlin-Heidelberg: Springer, 2006.
12. Vacca J. *The World's 20 Greatest Unsolved Problems*. — New Jersey: Prentice Hall-PTR, 2004.
13. Ashcroft N. // *Int. School of Physics «Enrico Fermi», Course CXLVII High Pressure Phenomena* / Ed. by R. Hemley, G. Chiarotti. — Amsterdam: Oxford, JOS Press, 2002. — P. 151.
14. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В. Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3.
15. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В. Фортова. — М.: Наука, ФИЗМАТЛИТ, 2000.

16. Hemley R., Mao H. // Int. School of Physics «Enrico Fermi», Course CXLVII, High Pressure Phenomena / Ed. by R. J. Hemley, G. Chiarotti, M. Bernasconi, L. Ulivi. — Amsterdam, Oxford: IOS Press, 2001. — P. 3.
17. Фортвов В. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества. — М.: Букос, 2005.
18. Kruer W. The Physics of Laser Plasma Interaction. — Reading MA: Addison-Wesley, 1988.
19. Adzeni S., ter Vehen J.M. The Physics of Inertial Fusion. — Oxford: Clarendon Press, 2004.
20. Lindle I. Inertial Confinement Fusion. — N.Y.: Springer, 1998.
21. Pukhov A. Strong field interaction of laser radiation // Rep. Prog. Phys. — 2003. — V. 66, No. 1. — P. 47.
22. Mourou G.A., Tajima T., Bulanov S.V. Optics in the relativistic regime // Rev. Mod. Phys. — 2006. — V. 78, No. 2. — P. 1804.
23. Energy from Inertial Fusion / Ed. by W. Hogan. — Austria: IAEA, 1995.
24. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества / Аврорин Е., Водолага Б., Симоненко В., Фортвов В. // УФН. — 1993. — Т. 163, № 5. — С. 1.
25. Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кардиоллы, Г. Кнопфеля. — М.: Мир, 1969.
26. Chen F. Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion. — N.Y.: Plenum Press, 1984.
27. Начало физики мегабарных давлений / Альтшулер Л.В., Крупников К.К., Фортвов В.Е., Фунтиков А.И. // Вестник РАН. — 2004. — Т. 74, № 11. — С. 1011.
28. Shock Waves and Extreme States of Matter / Fortov V.E., Altshuler L.V., Trunin R.F., Funtikov A.I. // High Pressure Shock Compression of Solids, VII / Ed. by R. Graham. — N.Y.: Springer, 2004.
29. Максимов Е.Г., Магницкая М.В., Фортвов В.Е. Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях // УФН. — 2005. — Т. 175, № 8. — С. 793.
30. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Канель Г., Разоренов С., Уткин А., Фортвов В. — М.: Янус-К, 1996.

## Глава 1

# ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА, ИХ КЛАССИФИКАЦИЯ

По мере продвижения вверх по шкале давлений и температур вещество (его состав, структура, свойства и т. п.) претерпевает радикальные изменения от идеального состояния невзаимодействующих нейтральных частиц, описываемого классической статистической функцией Больцмана до экзотических форм барионной и кварк-глюонной материи, отдельные проявления которой только сейчас начинают фиксироваться в рекордных по параметрам экспериментах по столкновению релятивистских ионов [1, 2], а также проявляться при интерпретации астрономических наблюдений так называемых «компактных» («нейтронных» и «странных» звезд [3]).

Реализуемые в природе давления и температуры схематически представлены на рис. 1.1.

Во втором разделе этой главы мы коснемся ультравысоких сжатий, когда на первый план выходят ядерные свойства вещества.

### 1.1. Электронная компонента

Рассмотрим сначала состояния вещества в условиях «умеренных» сжатий, когда его свойства определяются электронами, находящимися в оболочках атомов и ионов, а также свободными электронами. Речь пойдет о сжатых атомных и молекулярных системах и электрон-ионной «электромагнитной» плазме [1, 2, 5, 6].

Все эти интересные и сугубо нелинейные явления проявляются как в астрофизической, так и в лабораторной плазме, и несмотря на гигантские отличия в пространственных масштабах, имеют много общего, составляя предмет «лабораторной астрофизики» [7, 8].

В главе 2 рассмотрена область пониженных ( $T \ll J$ ,  $J$  — потенциал ионизации) температур и малых ( $\rho \ll \rho_c$  — плотность в критической точке) плотностей, где межчастичное взаимодействие мало и может быть учтено в рамках теории возмущений. С ростом плотности усиление взаимодействия в системе заставляет использовать чисто эмпирические описания, а при сверхкритических условиях — модели жидкостей (гл. 3), основанные на интегральных уравнениях, либо на беспараметрических методах молекулярной динамики или Монте-Карло.

Область жидкого состояния (гл. 3) традиционно считалась наиболее трудной и слабоизученной, так как сильное взаимодействие и неупорядоченность

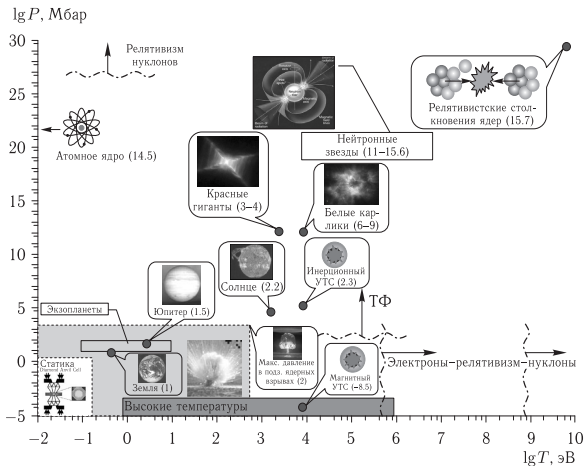


Рис. 1.1. Экстремальные состояния [4] в природе и в лаборатории. Цифры в скобках указывают логарифм плотности в  $\text{г/см}^3$ . Область «статика» соответствует статическому, «динамика» — динамическому методам получения высоких давлений, «высокие температуры» — экспериментам при высоких температурах

делают крайне неопределенными теоретические предсказания свойств реальных жидкостей [9]. Однако здесь удалось сформулировать реалистические модели нулевого приближения, основанные на использовании предельно упрощенных потенциалов твердых и мягких сфер, позволяющих применить численные методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Таким образом были воспроизведены основные качественные особенности наблюдаемых экспериментально структурных факторов и проанализирована природа плавления и кристаллизации (гл. 8). Уравнения состояния реальных жидкостей определяются на основе машинных расчетов с привлечением вариационного метода теории возмущений, причем параметры парного межчастичного потенциала находятся путем сравнения расчетных данных с результатами экспериментов.

Отсутствие надежных опытных данных при высоких давлениях и температурах в значительной степени сдерживает разработку реалистических моделей жидкости, справедливых вплоть до границы кипения, переводящего жидкость в пар или (металлы) непосредственно в плазменную фазу.

С увеличением температуры последовательно происходят диссоциация и ионизация сначала внешних ( $T \sim Z^4/3\text{Ry}$ ), а затем и внутренних ( $T \sim Z^2\text{Ry}$ ) электронных оболочек атомов, и мы попадаем в область плазмы (гл. 4), являющейся самым распространенным состоянием вещества в природе [1, 2, 5, 6]. Ведь в плазменном состоянии находится около 95–98% барионного вещества

в природе, за исключением темной материи и темной энергии. Термодинамические свойства плазмы описываются уравнениями ионизационного равновесия, в которых используются экспериментальные и расчетные данные по спектрам атомов и ионов или расчетные значения потенциалов ионизации. Границы применимости такого подхода в случае малых плотностей определяются нарушением условия локального термодинамического равновесия [5, 6].

В области более высоких сжатий сильное межчастичное взаимодействие оказывает влияние не только на свободные, но и на связанные в атомах и ионах электроны, вызывая деформацию дискретного энергетического спектра плазмы; наряду с термической, здесь на первый план выходит ионизация давлением, или «холодная» ионизация вещества. Условием этого эффекта является близость размеров атомов или ионов среднему межчастичному расстоянию,  $a_0 \sim n^{1/3}$ . Описание этого явления осуществляется с помощью моделей «ограниченного» атома, учитывающих конечный фактический размер иона и влияние плазменного окружения на его дискретный спектр [5, 6].

Фазовая диаграмма вещества, соответствующая высоким плотностям энергии проведена на рис. 1.2 [5, 6, 10–12], где отмечены условия в астрофизических объектах, в технических и лабораторных экспериментальных устройствах. Видно, что, являясь наиболее распространенным состоянием

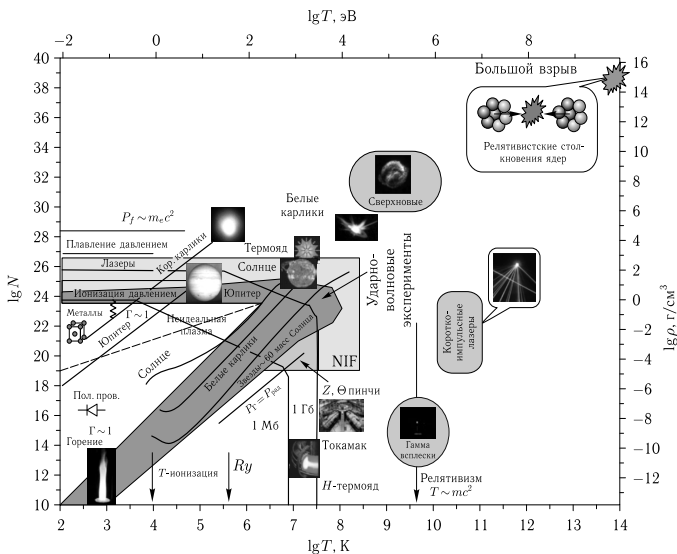


Рис. 1.2. Фазовая диаграмма состояний вещества [10, 11]

вещества в природе, плазма занимает практически всю область фазовой диаграммы. При этом особую трудность при физическом описании такой среды представляет область неидеальной плазмы, там где энергия межчастичного кулоновского взаимодействия  $e^2 n^{1/3}$  сравнима или превосходит кинетическую энергию движения частиц  $E_k$ . В этой области,  $\Gamma = e^2 n^{1/3}/E_k > 1$ , эффекты плазменной неидеальности не могут быть описаны теорией возмущений [4–6], а применение машинных беспараметрических методов Монте–Карло или молекулярной динамики [13, 14] связано с трудностями выбора адекватных псевдопотенциалов и правильного учета квантовых эффектов.

Эффекты релятивизма электронов в уравнении состояния и в транспортных свойствах плазмы, когда  $m_e c^2 \sim kT$ , соответствуют  $T \approx 0,5$  МэВ  $\approx 6 \times 10^6$  К. Выше этой температуры вещество становится неустойчивым по отношению к спонтанному рождению электрон-позитронных пар.

Квантовые эффекты определяются параметром вырождения  $n\lambda^3$  ( $\lambda \sim \sqrt{\hbar^2/2mkT}$  — тепловая дебройлевская длина волны). Для вырожденной плазмы,  $n\lambda^3 \gg 1$ , масштабом кинетической энергии является энергия Ферми,  $E_F \approx \hbar^2 n^{2/3}/2m$ , которая растет с ростом плотности плазмы, делая ее по мере сжатия,  $n \rightarrow \infty$ , все более идеальной;  $\Gamma = m_e c^2/(\hbar^2 n^{1/3}) \rightarrow 0$ . Условие релятивизма, соответствующее условию  $m_e c^2 \sim E_F \approx 0,5$  МэВ, дает плотность  $\rho \approx 10^6$  г/см<sup>3</sup>.

Похожая асимптотика имеется и в другом предельном случае,  $T \rightarrow 0$ , классической ( $n\lambda^3 \ll 1$ ) плазмы, где  $E_k \sim kT$  и плазма становится все более идеальной ( $\Gamma \sim e^2 n^{1/3}/(kT)$ ) при ее разогреве. Мы видим, что периферия фазовой диаграммы вещества (рис. 1.2) занята идеальной ( $\Gamma \ll 1$ ) бoльцмановской ( $n\lambda^3 \ll 1$ ) или вырожденной ( $n\lambda^3 \gg 1$ ) плазмой, для описания которой развиты сейчас адекватные физические модели [4–6, 10, 13, 15–18].



Рис. 1.3. Плазменный пылевой кристалл и плазменная жидкость

Электронная плазма в металлах и полупроводниках соответствует вырожденному случаю с энергией взаимодействия  $E_{int} \sim e^2/r_0$ ,  $r_0 \sim \hbar/k_F$ ,  $E_k \sim k_F^2/m$ ;  $\Gamma \sim e^2/\hbar v_F \approx 1-5$ , где  $v_F \sim 10^{-2}-10^{-3}$  м/с, индекс F относится к параметрам на границе Ферми.

Особый интерес представляют плазменные фазовые переходы в сильно неидеальных кулоновских системах: кристаллизация пылевой плазмы (рис. 1.3) [18, 19] и ионов в электростатических ловушках [20] и циклотронах [21, 22], в электролитах [23, 24] и коллоидных системах [25], в двумерных электронных системах на поверхности жидкого гелия [26], экситонная конденсация в полупроводниках [16] и т.д. Особо отметим недавно открытый фазовый переход в термической дейтериевой плазме [15–17, 27], квазиadiaбатически сжатой до мегабарных давлений серий реверberирующих ударных волн.

Для кварк-глюонной плазмы  $E_{\text{int}} \sim g^2/r_0$ ,  $r_0 \sim 1/T$ ,  $E_k \sim T$ ;  $\Gamma \sim g^2 \approx 1-50$ . Для ультрахолодной плазмы в ловушках  $\Gamma \sim (n/10^9)^{1/3}/T_k$ . Наибольшую трудность для теории представляет обширная область неидеальной плазмы  $\Gamma \geq 1$ , занятая многочисленными техническими приложениями (плазма металлов и полупроводников, импульсная энергетика, взрывы, дуги, электрические разряды и т.п.), где теория предсказывает качественно новые физические эффекты (металлизация, «холодная» ионизация, диэлектризация, плазменные фазовые переходы и т.п. [5, 6, 10, 28]), изучение которых требует значительных экспериментальных и теоретических усилий.

Поиск такого рода качественно новых эффектов в неидеальной области параметров является сильным и постоянно действующим стимулом исследований вещества при высоких плотностях энергии [5, 6, 10, 11].

Особый интерес при экстремальных энергетических воздействиях представляют нестационарные гидродинамические явления, такие как неустойчивости ударных волн и ламинарных течений [29], переход к турбулентному режиму [30], турбулентное перемешивание, динамика струй и солитонов [7, 30].

Другой характерной особенностью плазмы с высокими концентрациями энергии является коллективный характер ее поведения и сильная нелинейность ее реакции по отношению к внешним энергетическим воздействиям, таким как ударные и электромагнитные волны, солитоны, потоки лазерного излучения и быстрых частиц. Распространение электромагнитных волн в плазме возбуждает ряд параметрических неустойчивостей (рамановское, томпсоновское и бриллюэновское рассеяния), самофокусировку и филаментацию излучения, развитие неустойчивостей релятивистской природы, генерацию быстрых частиц и струй, а при более высоких интенсивностях — «вскипание» вакуума с рождением электрон-позитронных пар [8, 11, 28, 29, 31–40].

Структура и термодинамическое описание вещества существенно упрощаются в области чрезвычайно высоких давлений и плотностей, где электронные оболочки атомов оказываются раздавленными, и в атомах осуществляется квазихомогенное распределение электронной плотности, описываемое квазиклассическим приближением к методу самосогласованного поля (модель Томаса–Ферми), гл. 6.

С ростом плотности энергии вещество приобретает все более универсальную структуру [4, 41]. Различия между соседними элементами периодической системы сглаживаются, а свойства вещества становятся все более гладкими функциями его состава. Ввиду увеличения плотности энергии происходит явная «универсализация», или упрощение свойств вещества. Рост давления и температуры разрушает молекулярные комплексы, образуя атомарные состояния, которые затем теряют внешние электроны, ответственные за химическую индивидуальность вещества, из-за температурной ионизации и/или ионизации давлением. Электронные оболочки атомов и ионов перестраиваются, демонстрируя все более регулярное заполнение уровней, а кристаллическая решетка после серии полиморфных переходов (обычно это происходит при  $p < 0,5$  Мбар) переходит в плотно упакованную объемно-центрированную кубическую структуру [4, 41].

Эти процессы «упрощения» свойств вещества происходят при плотностях энергии, сравнимых с характерными энергиями указанных процессов «универсализации». Когда характерная плотность энергии становится порядка энергии валентных оболочек и составляет  $e^2/a_0^4 \approx 3 \cdot 10^{14}$  эрг/см<sup>3</sup> ( $a_0 = \hbar/(mc^2) = 5,2 \cdot 10^{-9}$  см — боровский радиус), это и определяет порядок величин нижней границы «универсализации» вещества,  $T \approx 10$  эВ,  $p_a \sim e^2/a_0^4 \approx 300$  Мбар. Здесь  $p_a$  так называемое «атомное» давление, — следующая из безразмерных оценок величина, по отношению к которой следует судить о «большом» или «малом» давлении в атомной системе. Точное количественное установление границ «универсализации» является ответственной задачей экспериментальной физики высоких плотностей энергии. Тем более, что теория [41] предсказывает и более разнообразное поведение вещества в ультрамегабарном диапазоне давлений (оболочечные эффекты [41], электронные и плазменные фазовые переходы [13–20, 42–45] и т. п.).

Верхняя граница области экстремальных состояний определяется уровнем современных знаний по физике высоких энергий [46–48], наблюдательными астрофизическими данными и ограничена, пожалуй, только нашим воображением.

При понижении давления и температуры поведение вещества определяется конкретной оболочечной структурой и характером заполнения электронных энергетических зон, а также симметрией кристаллических решеток. Классификация возможных состояний здесь весьма громоздка, а описание разнообразных ситуаций требует применения современных методов квантовой теории конденсированного состояния (гл. 4, 5, 7).

При достаточно высоких давлениях ( $p > 0,5$  Мбар) после серии полиморфных переходов в твердых телах реализуются структуры с плотной упаковкой, что позволяет применить модель сферических ячеек Вигнера–Зейтца, в которых ищется решение волнового уравнения с блоховскими граничными условиями [4, 41].

Дальнейшее увеличение плотности или температуры приводит к относительно уменьшению кулоновского взаимодействия, что позволяет пользоваться, соответственно, формулами идеального фермиевского или больцмановского электронного газа. Нижняя граница применимости модели Томаса–Ферми определяется приближенным учетом квантовых и обменных поправок и необходимостью учета оболочечной структуры элементов

Для детального изучения особенностей поверхности Ферми и описания малоплотных структур необходимо учесть несферичность задачи и использовать более рафинированные квантовомеханические модели присоединенных плоских волн и линейных МТ-орбиталей, метод функций Грина и т. п. Расчеты зонных структур в этих приближениях связаны с трудоемкими вычислениями и выполнены лишь для немногих элементов в ограниченной области фазовой диаграммы [4, 41].

Основным фактором, определяющим термодинамические свойства непереходных металлов, является слабо зависящий от внутриионного потенциала характер поведения валентных электронов [4, 41]. Это позволяет ввести псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия с предельно упрощенным

описанием ионного остова, причем его числовые параметры выбираются на основании опытных данных по форме поверхности Ферми. Отсутствие такого рода данных при высоких давлениях и температурах ограничивает возможности применения псевдопотенциальной модели в достаточно широкой области параметров.

Революционный прогресс в квантово-механическом описании сложных многоэлектронных структур был достигнут в результате разработки метода функционала плотности Кона и Шэма [49], что сделало возможным содержательный расчет широкого спектра элементов и соединений, в том числе и в сжатом состоянии.

Наиболее обширные и достоверные экспериментальные данные по уравнениям состояния рассматриваемого в этом разделе «электромагнитного» вещества при высоких давлениях получены сейчас динамическими методами, основанными на использовании сильных ударных волн для генерации и термодинамической диагностики возникающих состояний. Эти экспериментальные результаты являются основой для построения полуэмпирических уравнений состояния (гл. 9), созданных исходя из упрощенных представлений о спектре тепловых колебаний решетки и характере межчастичного взаимодействия в веществе и содержащих ряд свободных параметров для количественного описания экспериментов. Несмотря на сугубый эмпиризм, такие модели с высокой точностью описывают значительную область фазовой диаграммы, включая высокотемпературное плавление и испарение, и имеют правильные асимптотики в области газа Томаса–Ферми и идеальной плазмы.

Из проведенного анализа видно, что строго теоретическое описание свойств вещества возможно в области экстремальных давлений и температур, занимающей периферию фазовой диаграммы, в то время как наиболее интересная и важная в практических приложениях внутренняя ее часть доступна, в лучшем случае, лишь для модельных теорий. Это обстоятельство является действенным стимулом проводимых в настоящее время интенсивных теоретических и экспериментальных работ по изучению физических свойств вещества в условиях сильного межчастичного взаимодействия.

Более детальная классификация экстремальных состояний приведена в работе [4], которой мы и будем следовать при дальнейшем изложении.

Пока вещество остается в обычной электронно-ядерной форме, многие из его свойств определяются в основном электронами — наиболее легкими структурными единицами вещества. Ввиду значительной (3–4 порядка величины) разницы масс электронов и ионов их вклад в физические свойства можно рассматривать [4] отдельно, что составляет основу «адиабатического» приближения.

Уже отмечалось, что при переходе через границу универсального состояния вещества (кривые 1 на рис. 1.4 и 1.5) наружные электроны его атомов оказываются полностью обобществленными. Любое вещество, остающееся при таком переходе в твердом состоянии, обладает металлическими свойствами. На языке зонной теории «металлизация» вещества связана с уширением энергетических зон, в результате чего уровень Ферми электронов в конце концов попадает внутрь разрешенной зоны. Для вещества, находящегося в закритическом газообразно-жидком состоянии, пересечение кривой 1 при-

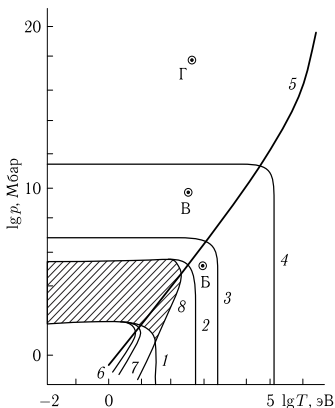


Рис. 1.4. Состояния электронной компоненты вещества. 1 — граница области универсальности (коллективизации внешних электронов), 2 — коллективизации большинства электронов ( $Z = 10$ ), 3 — коллективизации внутренних электронов ( $Z = 10$ ), 4 — граница релятивистской области, 5 — граница области вырождения, 6 — граница области квазиклассичности, 7 — граница применимости приближения самосоглазованного поля, 8 — граница области идеальности (однородности) электронного газа. Заштрихована область применимости модели Томаса–Ферми. Из [4]

водит к плазменному состоянию. Отметим, что степень ионизации на самой кривой 1 уже весьма велика [50]. Аналогично, металлизация полупроводников, обладающих узкой запрещенной зоной, начинается существенно ниже этой кривой. Наоборот, такие вещества, как литий, натрий, сначала переходят в диэлектрическое состояние и лишь при давлениях в мегабары окончательно превращаются в металл [51–55]. При не очень высоких температурах плазма будет сильно неидеальной и близкой по характеру движения ионов к обычной жидкости (см. гл. 4).

Остальные электроны атомов с не малым значением  $Z$  остаются вблизи кривой 1 в связанном состоянии. Большая их часть имеет энергию связи порядка  $Z^{4/3}e^2/a_0$  и локализована в объеме порядка  $Z^{-1}a_0^3$  (эти оценки возникают из модели Томаса–Ферми). Соответственно граница, где теряет связь с ядром большая часть электронов атома, определяется температурой порядка  $Z^{4/3} \cdot 10$  эВ и давлением порядка  $Z^{10/3} \cdot 10^2$  Мбар (кривая 2, рис. 1.4).

Еще наиболее сильно связанные с ядром ближайшие к нему электроны имеют энергию связи порядка  $Z^2e^2/a_0$  и объем их локализации  $Z^{-3}a_0^3$ . Эти электроны коллективизируются при температуре порядка  $Z^2 \cdot 10$  эВ и давлении порядка  $Z^5 \cdot 10^2$  Мбар (кривая 3 на рис. 1.4). В результате вещество превращается либо в полностью ионизованную электронно-ядерную плазму, либо в идеальный металл, решетка которого построена из «голых» ядер.

При относительно низких давлениях и температурах,  $T < m_e c^2$ , движение электронов может считаться нерелятивистским. Эффекты теории относительности становятся заметными, когда прирост энергии в результате сжатия или нагревания достигает величины порядка  $mc^2$  (соответствующая характерная длина  $\sim \hbar/mc$ ). Это отвечает давлению около  $10^{11}$  Мбар и температуре около  $10^5$  эВ (кривая 4 на рис. 1.4).

Динамическое описание электронной подсистемы удобно вести на языке характерных длин. Не считая боровского радиуса  $a_0$ , имеются четыре такие длины. Это прежде всего среднее расстояние между электронами  $d \sim n^{-1/3}$  ( $n$  — средняя концентрация электронов) и среднее расстояние между ядрами  $D \sim Z^{1/3}d$ . Далее, это дебройлевская длина волны электрона  $\lambda \sim \hbar/p$  ( $p$  — его средний импульс); при низких и высоких температурах имеем, соответственно,  $\lambda \sim n^{-1/3}$  и  $\lambda \sim \hbar/(mT)^{1/2}$ . Наконец, это характерная длина неоднородности  $l$ , на протяжении которой распределение электронов в пространстве меняется заметным образом. Эта величина совпадает с радиусом электронного экранирования и выражается через уже введенные длины,  $l \sim (a_0 d^3)^{1/2} / \lambda$ ; в холодном веществе  $l \sim a_0^{1/2} n^{-1/6}$ , в горячем —  $l \sim (T/e^2 n)^{1/2}$ .

При разных соотношениях между характерными длинами мы приходим к различным состояниям электронной подсистемы. Неравенство  $\lambda \ll d$  (либо  $n\lambda \ll 1$ ) отвечает классическому (больцмановскому) электронному газу; при  $\lambda \sim d$  (либо  $n\lambda \gtrsim 1$ ) имеет место состояние вырождения (рис. 1.2). Кривая, ограничивающая область  $\lambda \sim d$ , изображена на рис. 1.4 (кривая 5).

Условие  $\lambda \ll d$  означает, что длина волны электрона мало меняется на протяжении ее самой. Это, как известно, соответствует условию квазиклассичности движения электронов. В обратном предельном случае поведение электронов носит существенно волновой характер. Соотношению  $\lambda \sim l$  соответствует кривая 6, рис. 1.4.

При условии  $\lambda \ll (a_0 d)^{1/2}$  или, что то же самое,  $e^2 n^{1/3} \ll p^2/m$  энергия кулоновского взаимодействия пары электронов мала по сравнению с их кинетической энергией. Это, однако, еще не ведет к малости эффектов взаимодействия вообще. Дело в том, что имеется более сильное взаимодействие электронов с ядрами. Кроме того, из-за дальнего действия кулоновских сил электрон может взаимодействовать с большим числом своих соседей. Эти взаимодействия исчерпывающе описываются на языке средних величин, т. е. в рамках метода самосогласованного поля Хартри. Поэтому обсуждаемое неравенство фактически означает малость тех эффектов, которые не могут быть описаны в рамках приближения Хартри. Они носят название корреляционных эффектов и включают в себя наряду с обменными эффектами, связанными с принципом Паули, также и собственно корреляционные эффекты, описывающие отклонение истинного взаимодействия от среднего (подробнее см. [56]). Зависимость  $\lambda \sim (a_0 d)^{1/2}$  приведена на рис. 1.4 (кривая 7).

При еще больших давлениях или температурах становятся незначительными и только что упомянутые эффекты электронноядерного и коллективного электрон-электронного взаимодействия. При этом электронный газ можно описывать формулами идеального газа, а его распределение в пространстве становится практически однородным. Это происходит тогда, когда длина неоднородности  $l$  превышает наибольший параметр размерности длины; им оказывается среднее расстояние между ядрами  $D$ . Кривая  $l \sim D$  для  $Z = 10$  изображена на рис. 1.4 (кривая 8). Для произвольных значений  $Z$  ее можно получить из кривой 7, считая, что по осям отложены величины  $Z^{-10/3}p$  и  $Z^{-4/3}T$ . В области однородности значительная часть электронов может еще находиться в связанном состоянии (кривая 8 лежит внутри кривой 1.4).

В области, где электронный газ идеален, уравнение состояния вещества имеет известный вид [50]:  $p \sim \frac{\hbar^2}{m} n^{5/3}$  (нерелятивизм, область вырождения)  $p \sim \hbar c n^{4/3}$  (ультрарелятивизм, область вырождения),  $p \sim nT$  (больцмановская область). При более низких температурах и давлениях уравнение состояния меняется за счет эффектов кулоновского взаимодействия, вклада ядер и т. д. Здесь нужны детальные квантовомеханические расчеты либо полуэмпирические модели.

Как видно из рис. 1.4, кривые 6 и 7 лежат вне области, которую мы здесь рассматриваем. Поэтому при описании электронной подсистемы можно пренебречь корреляционными и квантовыми (отражающими неточность квазиклассического приближения) эффектами и пользоваться моделью Томаса–Ферми. Это относится к заштрихованной на рисунке области: в остальной части интересующей нас области экстремальных состояний электроны можно рассматривать вообще как идеальный газ. Подробности, касающиеся изложенных в этом разделе вопросов, можно найти в работах [56, 57], результаты численных расчетов — в работе [58].

На рисунке 1.4 отмечены также несколько характерных объектов, изображенных на рис. 1.1. Мы видим, что электроны в центральной части Солнца образуют нерелятивистский идеальный газ, который можно считать классическим, хотя и не очень далеким от состояния вырождения. Атомы водорода, составляющего преобладающий компонент вещества Солнца, полностью ионизованы, а атомы более тяжелых элементов могут сохранять еще некоторую долю электронов [59]. В центральной части белых карликов электронный газ идеален и вырожден. Для этого случая применима хорошо изученная модель однокомпонентного электронного газа на нейтрализующем фоне компенсирующего заряда [5, 6]. Релятивистские эффекты играют заметную роль. Вещество в этих условиях состоит из электронов и «голых» ядер. То же относится и к веществу в коре нейтронных звезд [3], где электронный газ может считаться ультрарелятивистским.

## 1.2. Ядерная компонента

Ядерная подсистема определяет агрегатное состояние вещества и протекание ядерных процессов. Не касаясь пока ядерных превращений при ультравысоких давлениях, рассмотрим вклад ядерной компоненты, считая сами ядра неизменными и определяющими химический состав вещества.

При высоких температурах, когда тепловая энергия велика по сравнению с кулоновской, вещество представляет собой плазму, близкую по своим свойствам к идеальному газу (рис. 1.4).

Агрегатное состояние определяет конкретные способы описания термодинамики тяжелых компонентов вещества и положение границ фазовых переходов, а ядерные реакции определяют стабильность элементного состава.

По мере уменьшения температуры или роста давления (последнее ведет к уменьшению среднего расстояния между ядрами) роль кулоновского взаимодействия между ядрами возрастает. По этой причине энергетически выгодным оказывается упорядочение ядерной подсистемы — переход вещества

в кристаллическое состояние. По другую сторону линии перехода в кристаллическое состояние мы будем иметь дело с жидкоподобной плазмой [60]. В частности, при нулевой температуре (и при не слишком малых и не слишком больших давлениях) всякое вещество будет находиться в твердом состоянии [61, 62].

Ограничимся рассмотрением вещества, содержащего ядра одного сорта, и для простоты пренебрежем изменением эффективного заряда иона в области внутри кривой 3 рис. 1.4. Чтобы сделать рассмотрение единым для всех элементов, будем исходить из естественных «ядерных» единиц плотности и температуры  $-\rho Z^3$  и  $Z^2 e^2 / a_0$  где  $a_0 = \hbar^2 / AMZ^2 e^2$  — боровский радиус ядра, и введем «приведенные» величины,

$$\rho^* = \rho Z^{-6} A^{-4}, \quad T^* = TZ^{-4} A^{-1},$$

на языке которых описание будет иметь универсальный характер. Однако для давления, которое определяется в основном электронной подсистемой, такая автомодельность уже не будет иметь места. Поэтому нам придется иметь дело с диаграммой «плотность-температура».

В плазменном состоянии ядерная подсистема описывается следующими характеристичными длинами: средним расстоянием между ядрами  $D \sim N^{-1/3}$  ( $N = n/Z$  — средняя концентрация ядер), дебройлевской длиной волны ядра  $\Lambda \sim \hbar/p$  ( $p$  — средний импульс ядра) и длиной неоднородности  $L \sim (A_0 D^3)^{1/2} / \Lambda$ , совпадающей с радиусом дебаевского экранирования плазмы. Как и в случае электронов, линия, отделяющая бальмовскую область от области вырождения ядер (см. кривую 1 на рис. 1.5), определяется условием  $D \sim \Lambda$ .

Роль эффектов кулоновского взаимодействия в плазме определяется относительной величиной длин  $D$  и  $L$ . Кривая  $D \sim L$  изображена на рис. 1.5 (кривая 2). В области больших температур и давлений легкие ядра (водород, гелий) «выгорают» в результате термоядерных реакций синтеза, а для более тяжелых ядер мы попадаем в релятивистскую относительно нуклонов область.

Интересующая нас линия фазового перехода в кристаллическое состояние должна лежать левее кривой 2, т.е. в области, где кулоновские эффекты играют важную роль. Если и плазма и возникающий из нее кристалл могут считаться классическими объектами, то уравнение для кривой плав-

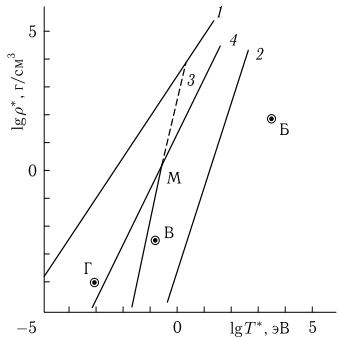


Рис. 1.5. Состояния ядерной компоненты вещества. 1 — граница области вырождения ядер, 2 — граница области идеальности, 3 — кривая плавления, 4 — граница области, в которой решетка может считаться классической. Из работы [4]

ления не должно содержать постоянной Планка. Имеется всего только одна комбинация характерных длин, которая, будучи безразмерной, не содержит  $\hbar$ . Это — отношение  $D/L$ . Очевидно поэтому, что уравнение кривой плавления должно иметь вид  $D/L = \text{const}$ . Значение этой константы для сильно сжатого вещества близко к 10. Это соответствует кулоновской энергии  $Z^2 e^2 N^{1/3}$ , на два порядка большей тепловой энергии  $T$ <sup>1)</sup>. Подчеркнем, что сказанное в точности соответствует известному критерию Линдемана: на кривой плавления отношение  $\delta_m$  средней амплитуды колебаний ядер к среднему расстоянию между ядрами есть постоянная величина (см. [64, 65]). В нашем случае  $\delta_m \approx 1/4$  [66].

Линия фазового перехода изображена на рис. 1.5 (кривая 3). Хотя она и лежит правее кривой 1, определяющей границу области классической плазмы, тем не менее исходные предположения о применимости классической статистики справедливы не на всем протяжении кривой 3. Дело в том, что характер движения ядер в кристалле существенно иной, чем в плазме. Иным будет и критерий применимости статистики Больцмана: амплитуда нулевых колебаний ядер должна быть малой по сравнению с полной амплитудой, включающей и тепловые колебания. Этот критерий сводится к очевидному условию  $\hbar\omega_D \ll T$ , где  $\omega_D$  — дебаевская частота. В рассматриваемых нами условиях  $\omega_D \approx 0,45\omega_0$ , где  $\omega_0 = (4\pi NZ^2 e^2 / AM)^{1/2}$  — плазменная частота ядер [67]. Кривая  $\hbar\omega_D \sim T$  изображена на рис. 1.5 (кривая 4). Точка пересечения  $M$  кривых 3 и 4 ограничивает достоверный участок кривой плавления, изображенный жирной линией. Мы приводим также диаграмму «давление-температура» для  $Z = 6$ ,  $A = 12$  (рис. 1.6), аналогичную диаграмме рис. 1.5.

Для грубо качественного описания хода кривой плавления в квантовой области можно использовать критерий Линдемана и известные формулы для квантового осциллятора [61]. На этом же рисунке изображена обычная фазовая диаграмма с тройной точкой.

Квантовые эффекты приводят к загибу кривой плавления в сторону высоких давлений и низких температур, что в свою очередь ведет к появлению предельных значений температуры, плотности и давления, выше которых кристаллическое состояние невозможно. Остановимся подробнее на эффекте «холодного плавления», который в принципе должен иметь место и при нулевой температуре. Именно этим эффектом объясняется существование жидкого гелия при низких температурах и атмосферном давлении. Холодное плавление происходит за счет нулевых колебаний ядер: энергия таких колебаний  $\hbar\omega_D \sim N^{1/2}$  при достаточно высоких сжатиях превышает кулоновскую энергию связи решетки, пропорциональную  $N^{1/3}$ . Надежному описанию этого явления препятствует чрезвычайно резкая зависимость плотности плавления  $\rho_m$  от константы Линдемана,  $\rho_m = \delta_m^{12}$ , тем более, что сама эта константа оказывается в сильной степени непостоянной [68]. Имеющиеся в литературе оценки дают для  $\rho_m$  значения, лежащие в диапазоне  $10^3 - 10^8$  г/см<sup>3</sup> [67, 69–72]. Исключая самые легкие ядра, величина  $\rho_m$ ,

<sup>1)</sup> Изменение плотности при фазовом переходе, совершающемся при постоянном давлении, в рассматриваемых условиях совершенно ничтожно (не более сотой доли процента; см. [63]). Это позволяет использовать плотность как однозначную переменную.

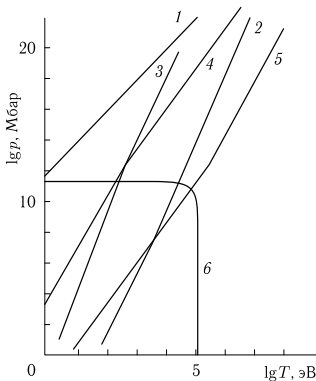


Рис. 1.6. Состояния электронной компоненты вещества в координатах  $p, T$  для углерода. 5 — граница области вырождения электронов, 6 — граница области релятивизма электронов. Из [4]



Рис. 1.7. Примерный вид фазовой диаграммы,  $\alpha$  — тройная точка. Из [4]

возможно, попадает в область ядерных плотностей,  $\rho_m \approx 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. Поэтому вопрос о самой реальности рассматриваемого явления остается до сих пор открытым.

Остановимся на некоторых астрофизических приложениях. На рисунках 1.1, 1.5 нанесены точки, отвечающие условиям в центре Солнца (водород), в центре типичного белого карлика (углерод), в коре нейтронной звезды — пульсара (железо). Из рисунка (рис. 1.5) видно, что вещество Солнца находится в плазменном состоянии, вещество белого карлика — в состоянии, близком к кристаллизации [61], вещество коры пульсара — в состоянии твердого тела [73].

Отметим для полноты изложения, что аномальный вид кривых плавления с температурным максимумом наблюдается также в экспериментах для ряда веществ (щелочные металлы и т. д.) и носит иной характер. Этот эффект мы рассмотрим подробнее в гл. 8.

### 1.3. Ядерные трансформации

Когда температура или давление становятся достаточно большими, в веществах в заметных масштабах начинают происходить экзотермические ядерные превращения [4]. Важность этих процессов, не говоря уже о термоядерном синтезе в земных условиях, определяется тем, что они служат основным источником энергии звезд (в том числе Солнца), представляют собой существенный фактор эволюции небесных тел и, наконец, формируют химический

состав вещества. Характерными примерами экзотермических реакций могут служить превращения  $4p \rightarrow \text{He}^4$  и  $3\text{He}^4 \rightarrow \text{C}^{12}$ ; первое из них осуществляется по схеме углеродного или водородного цикла.

Хотя рассматриваемые реакции и идут с выделением энергии, для их протекания с заметной скоростью необходимо, чтобы внешние условия были в достаточной степени экстремальными. Это нужно для преодоления кулоновского барьера, препятствующего сближению ядер-реагентов. При нагревании вещества проницаемость барьера растет в результате увеличения относительной энергии реагентов, при сжатии — в результате искажения (сужения) самого барьера. Этим двум режимам протекания ядерных реакций, называемым соответственно термо и пикноядерным, соответствуют и различные кинетические механизмы реакции. Скорость термоядерной реакции, протекающей в плазме, наряду с фактором проникновения через барьер, определяется числом партнеров, встреченных данным ядром в единицу времени при его движении внутри вещества. Скорость пикноядерной реакции, протекающей в конденсированном веществе, определяется числом сближений ядер-реагентов, колеблющихся около соседних положений равновесия, в единицу времени, т. е. частотой таких колебаний. Рассмотрим, следуя [4], классификацию режимов ядерных реакций при различных температурах и давлениях.

Ограничимся для простоты рассмотрением вещества, состоящего из ядер одного сорта, которые и вступают в реакцию друг с другом. При относительно высоких температурах и низких плотностях, когда плазма мало отличается от идеального газа, фактор проникновения через барьер почти совпадает с соответствующим выражением для пары изолированных ядер [74]:

$$f \sim \exp(-\tau^{1/3}), \quad \tau = \frac{27\pi^2 Z^2 e^2}{4 A_0 T} \sim 1/T.$$

В предположении  $\tau \gg 1$  (иначе вещество слишком быстро выгорит) эффективная энергия реагирующих ядер (энергия гаммовского пика) лежит на хвосте максвелловского распределения,  $T_{\text{эф}} \sim \tau T \gg T$ . Из-за малости среднего расстояния между ядрами по сравнению с радиусом Дебая влияние остального вещества сводится к появлению в показателе экспоненты малой поправки, отражающей эффект экранирования кулоновского взаимодействия теми частицами, которые не участвуют в реакции. Это так называемый термоядерный режим со слабым экранированием. Соответствующая область лежит правее кривой 1 на рис. 1.8, совпадающей с кривой 2 рис. 1.5 и отвечающей условию  $D \sim L$ .

Отметим в этой связи работу [75], где предсказано более слабое (степенное по сравнению с экспоненциальным) спадание функции распределения для больших импульсных реагентов, заметно увеличивающих скорость термоядерных реакций при малых температурах.

При переходе через эту границу эффекты кулоновского взаимодействия в плазме становятся значительными, и мы попадаем в область жидкоподобной плазмы, а после пересечения кривой 3 рис. 1.5 — в область твердого тела. Однако различие между этими состояниями с интересующей нас точки зрения несущественно, так как для ядерных реакций важен только ближний порядок. Переход вещества в конденсированное состояние сильно сказывается на

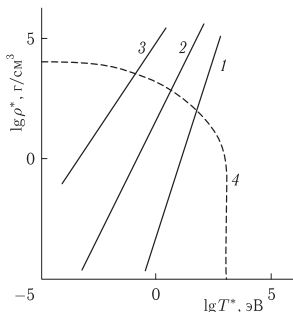


Рис. 1.8. Режимы экзотермических ядерных реакций. 1 — граница между термоядерными режимами с сильным и слабым экранированием, 2 — граница между термоядерным режимом с сильным экранированием и пикноядерным режимом с горячими ядрами, 3 — граница собственно пикноядерного режима, 4 — примерный вид «порога» для водородной реакции. Из [4]

виде потенциала взаимодействия между ядрами, но сами они еще далеко за границей рассматриваемой области и могут считаться в определенном смысле свободными. Дело в том, что, как уже указывалось, эффективная энергия сталкивающихся ядер  $T_{\text{эф}}$  значительно превышает реальную температуру системы. Поэтому в действительности кулоновские эффекты станут существенными с точки зрения кинетики реакции, когда  $D$  окажется величиной порядка эффективного радиуса Дебая, получающегося из обычного выражения заменой  $T$  на  $T_{\text{эф}}$ . Этим и определяется левая граница рассматриваемой области (см. кривую 2 рис. 1.8); эта кривая совпадает с кривой 4 рис. 1.5. Обсуждаемый режим носит название термоядерного режима с сильным экранированием. Коэффициент проникновения для этого режима сильно изменен эффектами экранирования; его выражение приведено в работе [76].

При еще более низких температурах «замороженными» можно считать и ядра-реагенты. Определяющую роль при этом начинают играть колебания ядер около положений равновесия. Пока  $T_{\text{эф}}$  велико по сравнению с  $\hbar\omega_D$ , эти колебания имеют в основном тепловой характер. Это — пикноядерный режим с горячими ядрами. Левая граница рассматриваемой области определяется условием  $\hbar\omega_D \sim T_{\text{эф}}$ .

Наконец, левее этой кривой мы попадаем в область собственно пикноядерного режима [72, 76–78], где реакция идет за счет нулевых колебаний ядер. При достаточно высоких сжатиях реакция может идти и при равной нулю температуре в результате сужения кулоновского барьера до ширины порядка  $D \sim N^{-1/3}$ . Соответствующий фактор проникновения имеет вид

$$f \sim \exp(-\chi), \quad \chi \approx 2,8/(A_0 N^{1/3})^{1/2} \sim \rho^{*-1/6},$$

где, как и ранее, мы должны считать  $\chi \gg 1$ .

Хотя рассматриваемые реакции и не имеют порога в точном смысле этого слова, заметный выход реакции возникает лишь при достаточно высоких температурах или давлениях. Для водородной реакции, это  $T \approx 10^2 - 10^3$  эВ или  $\rho \approx 10^4 - 10^5$  г/см<sup>3</sup>, для гелиевой реакции температура повышается до  $10^4$  эВ. При совместном действии нагревания и сжатия соответствующую границу можно было бы найти из приведенных в работе [76] громоздких

выражений для фактора проникновения при всех перечисленных режимах. Мы ограничимся приведением чисто качественной кривой для водородной реакции (кривая 4 рис. 1.8).

Укажем в качестве примера, что ядерные реакции в недрах Солнца и подобных ему звезд идут в режиме термоядерной реакции со слабым экранированием; это прямо видно из диаграммы рис. 1.5. В заключение этого раздела кратко остановимся на важных с точки зрения «земных» приложений реакциях  $d + d \rightarrow T - p$  (или  $\rightarrow He^3 + n$ ) и  $d + T \rightarrow He^4 - n$ . Эти реакции, в отличие от рассмотренной выше водородной реакции, идут за счет сильного взаимодействия и по этой причине их чисто ядерное сечение на двадцать порядков больше сечения водородной реакции, протекающей за счет слабого взаимодействия. Однако «пороговая» температура и «пороговая» плотность для этих реакций сравнительно близки (в логарифмическом смысле) к указанным на рис. 1.8 значениям. Это связано с резкой зависимостью фактора проникновения от  $T^*$  и  $\rho^*$ . Отметим, что предложенный в свое время Я.Б. Зельдовичем и А.Д. Сахаровым мюонный катализ рассматриваемых реакций мог бы рассматриваться как своеобразный способ «сжатия» вещества; поскольку радиус мезоатома примерно в 200 раз меньше радиуса обычного атома, речь идет об увеличении эффективной плотности почти на семь порядков.

#### 1.4. Ядерные трансформации и новые формы вещества

Конечный результат процессов, рассмотренных в предыдущем разделе, состоял лишь в перегруппировке нуклонов, приводящей к переходу одних ядер в другие. При этом не происходило изменения структурного состава вещества на уровне элементарных частиц и возникновения новых его форм. Между тем такого рода превращения при достаточно высоких температурах и давлениях неизбежны и играют важную роль в суперэкстремальных условиях. Мы отвлекаемся от возникновения в результате водородной реакции нейтрино и позитронов, которые либо уходят из вещества, либо аннигилируют. Поэтому они во всяком случае не образуют новой формы вещества.

Начнем с простейшего процесса появления при высоких температурах равновесного теплового излучения, как отдельной компоненты вещества, вносящего заметный вклад в его УРС. Используя для давления излучения известную формулу  $p \sim T^4 / \hbar^3 c^3$  (см. кривую 1 на рис. 1.9), легко видеть, что вблизи этой кривой фотонная компонента вещества вносит в давление большой и даже определяющий вклад.

Опыты с подземными ядерными взрывами [79], позволяют вплотную приблизиться к этому «радиационно-доминирующему» режиму.

Очень близкую картину можно было бы получить для нейтринной компоненты вещества. Однако нейтрино уходят из объема огненного «шара» при релятивистских столкновениях ионов или небесных тел, поэтому обычно не находятся в условиях локального термодинамического равновесия, необходимого для применения формализма термодинамики и, следовательно, УРС, и могли бы играть роль как особая компонента вещества лишь на ранних этапах эволюции Вселенной (см. [80]).

Переходим к процессу рождения электронно-позитронных пар и к возникновению позитронной компоненты вещества. Этот процесс имеет эндотермический характер (соответствующий порог  $-2mc^2 \approx 1$  МэВ). При  $T \gg mc^2$  выражение для давления позитронов практически то же что и для излучения, а при  $T < 2mc^2$  возникает экспоненциальный пороговый фактор  $\exp(-2mc^2/T)$ . Граница области, где давление позитронов существенно, дается кривой 2 рис. 1.9. Рождению мюонных, барионных и других пар отвечают более высокие пороги.

Перечисленные процессы характеризуются тем, что для их протекания необходимо термическое возбуждение системы. Соответственно, при малых температурах эти процессы имеют ничтожно малую интенсивность. К их числу относится и термическая диссоциация ядер, в частности, ядер наиболее устойчивого изотопа  $Fe^{56}$ . Эта реакция сводится к превращениям  $Fe \rightarrow 13He^4 + 4n$ ,  $He^4 \rightarrow 2p + 2n$  и ведет к появлению нейтронной компоненты вещества. На рис. 1.10 мы приводим заимствованную из работы [81] (см. также [80]) диаграмму. Кривая 1 отвечает половинной диссоциации железа, кривая 2 — гелия.

Важнейший тип превращения, идущего и в холодном веществе, — это его нейтронизация, т. е. захват ядром электрона с превращением внутриядерного протона в нейтрон [3]. Эта реакция идет по схеме  $(A, Z) - e^- \rightarrow (A, Z - 1)$ . Поскольку исходное ядро считается стабильным, а возникающее нейтронно избыточное ядро имеет более высокую энергию, процесс нейтронизации эндотермичен и имеет порог  $\Delta Mc^2 = (M_{Z-1}^A - M_Z^A)c^2$ . Необходимая для преодо-

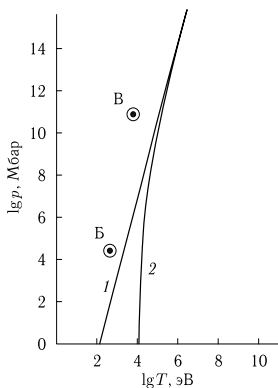


Рис. 1.9. Фотонная и позитронная компоненты вещества. 1 — давление фотонной, 2 — позитронной компонент. Из [4]

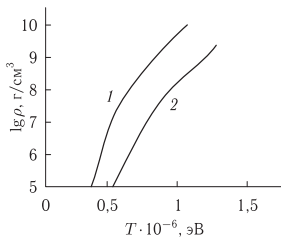


Рис. 1.10. Тепловая диссоциация «железо-гелий-нуклоны». 1 — кривая половинной диссоциации железа, 2 — гелия. Из [4]

ления порога энергия черпается в холодном веществе <sup>1)</sup> из гравитационного источника: силы тяготения сжимают звезду, увеличивают энергию Ферми электронов и «разгоняют» их до нужной энергии. При высоких температурах нейтронизация идет за счет увеличения тепловой энергии электронов и связана с обычным механизмом химического равновесия. Нейтронизации вещества посвящена довольно обширная литература (см. например, [3, 50, 80, 82–87]). Однако многие относящиеся сюда вопросы еще требуют своего количественного решения, вследствие несовершенства существующих методов описания многонуклонных и, в особенности, содержащих еще более тяжелые частицы ядерных систем. Поэтому мы ограничимся ниже несколькими замечаниями и небольшим числом количественных оценок. Последние, за немногими исключениями, носят весьма ориентировочный характер.

Порог нейтронизации определяется формулой  $\rho \sim \frac{Mc^2}{\hbar^3} [(\Delta M)^2 - m^2]^{3/2}$ .

Соответствующее давление при  $\Delta M \gg m$  имеет вид  $p \sim \frac{c^5(\Delta M)^4}{\hbar^3}$ . Укажем в качестве примера, что пороговые значения плотности и давления составляют: для перехода  $C_6^{12} \rightarrow B_5^{12}$ , соответственно,  $4 \cdot 10^{10}$  г/см<sup>3</sup> и  $6 \cdot 10^{16}$  Мбар, для перехода  $Si_{14}^{28} \rightarrow Al_{13}^{28}$ , соответственно,  $2 \cdot 10^9$  г/см<sup>3</sup> и  $8 \cdot 10^{11}$  Мбар.

При давлениях выше порогового возникнут «перегруженные» нейтронами ядра. Вплоть до плотности около  $10^{11}$  г/см<sup>3</sup> и давления порядка  $10^{18}$  Мбар эти ядра сохраняют свое массовое число и происходит лишь уменьшение их заряда. Это связано с тем, что нестабильность таких ядер вне вещества проявлялась бы в их  $\beta$ -распаде. Однако в веществе такой распад невозможен из-за высокой границы Ферми электронов. При больших плотностях и давлениях становится выгодным развал ядер с освобождением их от излишних нейтронов. При этом возникает самостоятельная нейтронная компонента вещества. При еще больших плотностях (предположительно около  $5 \cdot 10^{13}$  г/см<sup>3</sup>) ядра разваливаются окончательно и вещество превращается в смесь нейтронов, протонов и электронов, причем концентрация заряженных частиц примерно на два порядка меньше концентрации нейтронов [83, 84]. Дальнейшее возрастание плотности сопровождается появлением в веществе новых элементарных частиц, которые в обычных условиях нестабильны. Это прежде всего мюоны (порог образования — около  $10^{14}$  г/см<sup>3</sup>), распаду которых препятствует высокая граница Ферми электронов, а затем гипероны, резонансы и т. д. (пороги в области  $10^{14}$ – $10^{15}$  г/см<sup>3</sup>) [84, 85, 87].

Рекордно-высокие плотности энергии достигаются сегодня при фронтальном столкновении тяжелых ионов (рис. 1.11), ускоренных в синхротронах до субсветовых скоростей. Эти опыты направлены на поиск новых частиц, на экспериментальное исследование фундаментальных проблем физики высоких энергий при столкновениях адронов, которые сопровождаются образованием сверхплотного ядерного вещества — кварк-глюонной плазмы (КГП) (рис. 1.12). Так на ускорителях в ЦЕРНе, Брукхейвене и Дармштадте были проведены уникальные эксперименты по генерации ультраэкстремального

<sup>1)</sup> Термин «холодное» весьма условен и относится к температурам, низким по сравнению с  $\Delta Mc^2$ .

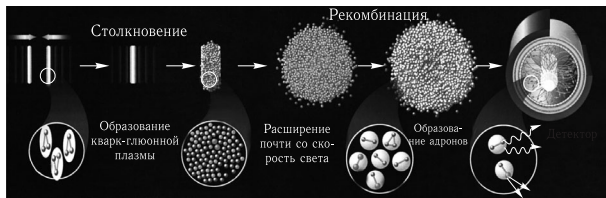


Рис. 1.11. Динамика столкновений релятивистских тяжелых ядер на ускорителях [88]

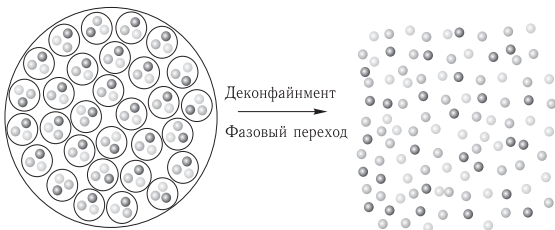


Рис. 1.12. Образование кварк-глюонной плазмы. При обычных условиях (слева) кварки (шарики) связаны в адронах. При температурах  $T > T_c$  происходит деконфайнмент кварков и они перестают быть связанными в адронах и образуют кварк-глюонную плазму

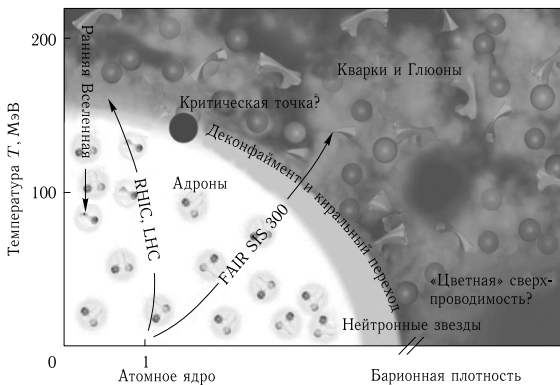


Рис. 1.13. Фазовая диаграмма ультраплотного вещества [89, 90]



Рис. 1.14. Космическая шкала времени. Расширение Вселенной после Большого взрыва [88]

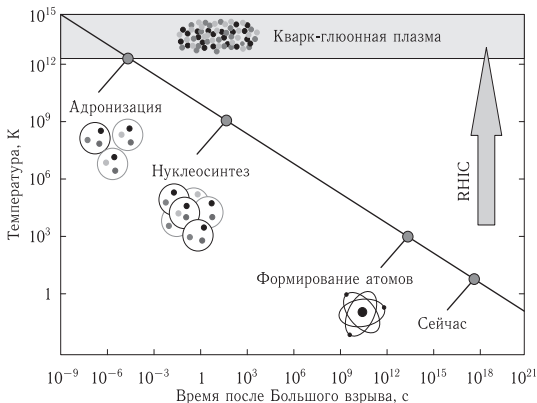


Рис. 1.15. Трансформация материи после Большого взрыва. Стрелка — параметры ускорителя RHIC

барионного вещества в сверхплотном и разогретом состоянии с плотностью порядка  $10^{15}$  г/см<sup>3</sup>, давлением  $10^{30}$  бар и температурой примерно 200 МэВ (рис. 1.13) в индивидуальных актах столкновений тяжелых ядер Cu-Cu и Au-Au. В соответствии с современными представлениями, именно в таком состоянии находилось вещество Вселенной уже в первые микросекунды после Большого Взрыва (рис. 1.14, 1.15), а также находится вещество таких астрофизических объектов, как  $\gamma$ -всплески, нейтронные звезды и черные дыры.

КГП состоит из кварков, антикварков и глюонов [91–94]. Такую плазму иногда называют наиболее «старой» формой материи, так как она существовала уже в первые микросекунды после Большого взрыва, и из нее по мере расширения и охлаждения образовались адроны. КГП обладает максимальной плотностью, примерно  $9\text{--}10\rho_0$  ( $\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> — ядерная плотность), и может возникать в центре нейтронных звезд, черных дыр или при коллапсе обычных звезд (см. п. 12.1).

Еще одним «экспериментальным» проявлением КГП являются обсуждаемые сейчас компактные астрофизические объекты — «странные» звезды [1, 2], состоящие из КГП высокой плотности и являющиеся следующей, более глубокой, стадией нейтронных звезд [1–3].

## 1.5. Эксперимент и астрономические наблюдения

Приведем схему трансформации вещества при высоких плотностях энергии (рис. 1.16), которая в определенном смысле иллюстрирует тезис об упрощении вещества при движении в область экстремально высоких давлений и температур (рис. 1.1).

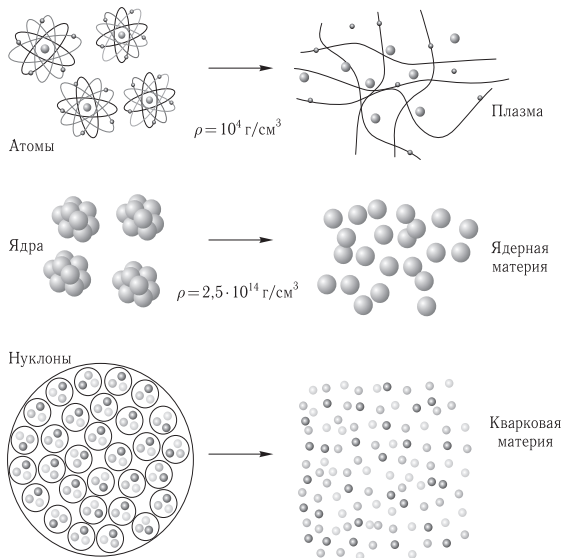


Рис. 1.16. Трансформация вещества при высоких плотностях энергии

Наши экспериментальные возможности хотя и быстро прогрессируют, но, конечно, способны лишь частично вторгнуться в область экстремальных состояний. Для них оказываются доступными левый нижний и правый верхний участки диаграммы состояний вещества (рис. 1.2) в то время как большая его промежуточная часть занята разнообразными астрофизическими объектами. Эти звездные объекты являются не только предметом применения УРС для описания их структуры и наблюдаемых характеристик, но и в ряде случаев являются источником информации для построения и проверки моделей сжатого горячего вещества. Примерами могут служить работы по геосейсмологии [59] и по изучению нейтронных и странных звезд [3]. Прочность вещества резко ограничивает применение статических методов исследования высоких плотностей энергии, так как подавляющее большинство конструктивных материалов неспособно выдержать интересующие нас давления [1, 2]. Исключение составляет алмаз — рекордсмен по твердости ( $\sigma_n \approx 500$  кбар), что позволяет, используя его в алмазных наковальнях, достигать в статических опытах давлений 3–5 Мбар [14, 44, 112].

Пальма первенства принадлежит сейчас динамическим методам [1, 2, 5, 6, 10, 12, 42, 43, 45, 113], основанным на импульсной кумуляции высоких плотностей энергии в веществе. Здесь существует два различных

Таблица 1.1. Физические условия, соответствующие высоким плотностям энергии  $10^4$ – $10^5$  Дж/см<sup>3</sup> [11]

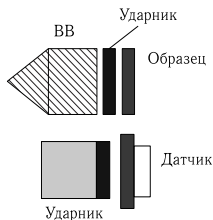
Физические условия	Значения физических параметров
Плотность энергии $W$ Давление $p$	$W \approx 10^4$ – $10^5$ Дж/см <sup>3</sup> $p \approx 0,1$ Мбар
Конденсированные взрывчатые вещества давление температура плотность скорость детонации	$W \approx 10^4$ Дж/см <sup>3</sup> $\approx 400$ Кбар, $\approx 4000$ К, $\approx 2,7$ г/см <sup>3</sup> , $\approx 9 \cdot 10^5$ см/с
Удар алюминиевой пластины по алюминию, скорость	$5$ – $13,2 \cdot 10^5$ см/с
Удар молибденовой пластины по молибдену, скорость	$3$ – $7,5 \cdot 10^5$ см/с
Электромагнитное излучение лазер, интенсивность $q$ ( $W \sim q$ ) температура черного тела $T$ ( $p \sim T^4$ )	$2,6 \cdot 10^{15}$ – $3 \cdot 10^{15}$ Вт/см <sup>2</sup> $2 \cdot 10^2$ – $4 \cdot 10^2$ эВ
Напряженность электрического поля $E$ ( $W \sim E^2$ ) Индукция магнитного поля $B$ ( $W \sim B^2$ )	$0,5 \cdot 10^9$ – $1,5 \cdot 10^9$ В/см $1,6 \cdot 10^2$ – $5 \cdot 10^2$ Тл
Плотность плазмы при температуре $T = 1$ кэВ ( $p = nkT$ )	$6 \cdot 10^{19}$ – $6 \cdot 10^{20}$ см <sup>-3</sup>
Интенсивность лазерного излучения $q$ , для $\lambda = 1$ мкм, $W \sim q^{2/3}$ температура черного тела $T$ ( $p \sim T^{3,5}$ )	$0,86 \cdot 10^{12}$ – $4 \cdot 10^{12}$ Вт/см <sup>2</sup> $66$ – $75$ эВ

направления работ. Это экспериментальное изучение физических свойств электромагнитной плазмы мегабарного диапазона давлений при столкновении макроскопических ударников со скоростями в километры, десятки километров в секунду (рис. 1.17) и изучение свойств сжатого ядерного вещества при фронтальном столкновении ядер, движущихся с релятивистскими скоростями (рис. 1.11, 1.18). Рассмотрим сначала первый из этих подходов — изучение макроскопических объемов сжатого вещества [1, 2]. Время жизни таких высокоэнергетических состояний определяется временем инерционного разлета плазмы, имеющего характерный масштаб  $10^{-10}$ – $10^{-6}$  секунд, что требует применения изощренных быстрых средств диагностики. Физические условия, соответствующие нижней границе интересующих нас состояний приведены в табл. 1.1 [5, 6, 11, 114]. Видно, что получение высоких плотностей энергии в плазме предъявляет весьма серьезные требования к средствам генерации, делая необходимым эффективную пространственную и временную компрессию мощности.

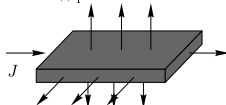
Для этой цели удобным инструментом являются мощные ударные волны [79, 116, 117], возникающие в результате нелинейных гидродинамических явлений при движении вещества. В вязком скачке уплотнения, называемом

**ВЗРЫВНАЯ ТЕХНИКА, ПУШКИ**

Плосковолновые линзы  
 Разгон пластин  
 Кумуляция  
 Одноступенч. пушки  
 Пороховые пушки  
 2-ступенчатые пушки  
 Рельсотроны

**ЭЛЕКТРОВЗРЫВ**

Цилиндры } + оболочка  
 Фольги }

**ИЗЛУЧЕНИЕ**

Лазерное излучение  
 Электронные пучки  
 Пучки ионов  
 Мягкое рентгеновское  
 Ядерные взрывы

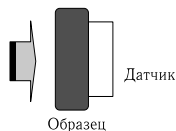


Рис. 1.17. Схемы генерации мощных ударных волн для изучения макроскопических количеств электромагнитной плазмы

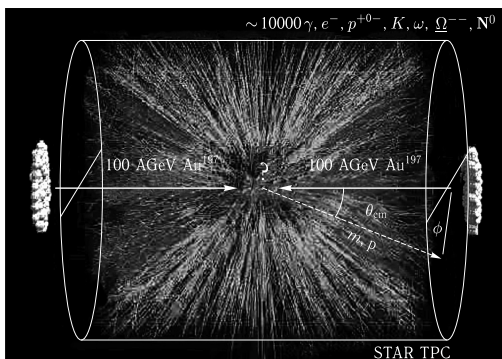
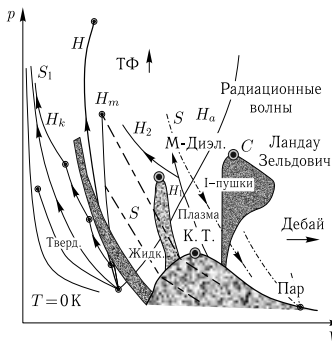


Рис. 1.18. Столкновение релятивистских адронов [115]

фронтом ударной волны, кинетическая энергия набегающего потока преобразуется в тепловую энергию сжатой и необратимо разогретой среды. Этот способ генерации (адиабата Гюгонио  $H$  на рис. 1.19 не имеет ограничений



Pb: 5000 K, 2 кбар. Al: 8000 K, 4,5 кбар. W: 21000 K, 15 кбар

Рис. 1.19. Термодинамические траектории динамических методов исследования вещества [5, 6]. Внизу даны параметры критических (К. Т.) точек ряда металлов

по величине получаемых давлений) ограничен короткими временами жизни ударно-сжатого вещества. Поэтому методы диагностики таких состояний должны иметь высокое временное разрешение. Именно с таким временным разрешением выполняются электроконтактные и оптические регистрации временных интервалов движения ударных разрывов и контактных поверхностей, пирометрические, спектроскопические, рентгеновские дифракционные и адсорбционные, интерферометрические лазерные измерения, а также регистрации низко- и высокочастотной холловской электропроводности; фиксации пьезо- и магнитоэлектрических явлений [10, 28].

Характерная черта техники ударных волн состоит в том, что они позволяют получать высокие давления и температуры в сжатых средах в то время, как область пониженных плотностей (включая кривую кипения и окрестность критической точки) оказывается для них недоступной. Исследовать промежуточные между твердым телом и газом состояния плазмы позволяет метод изоэнтропического расширения, основанный на генерации плазмы при адиабатическом расширении конденсированного вещества (кривая  $S$  на рис. 1.19), предварительно сжатого и необратимо разогретого во фронте мощной ударной волны.

Мы видим, что динамические методы в различных своих комбинациях дают возможность реализовать и исследовать широкий спектр экстремальных состояний вещества с разнообразным и сильным межчастичным взаимодействием. При этом оказывается возможной не только фактическая реализация условий с высокими концентрациями энергии, но и достаточно полная диагностика этих экзотических состояний, так как ударные и адиабатические волны являются не только средством генерации, но и специфическим инструментом диагностики экстремальных состояний вещества [43, 45, 118].

Динамические методы диагностики применяются как для изучения макроскопических объектов вещества электромагнитной плазмы, так и для изучения сжатой ядерной материи — кварк-глюонной плазмы [1, 2, 10]. Они основаны на использовании связи термодинамических свойств исследуемой ударно-сжатой среды с наблюдаемыми в эксперименте гидродинамическими явлениями, возникающими при кумуляции в веществе высоких плотностей энергии [43, 45]. В общем виде эта связь выражается системой нелинейных (трехмерных по пространственным координатам) дифференциальных уравнений нестационарной газовой динамики, полное решение которой затруднено даже для наиболее мощных современных супер-компьютеров. По этой причине в динамических исследованиях макроскопического вещества (ЭМП) стремятся использовать автомодельные решения типа стационарной ударной волны и центрированной волны разрежения Римана [43, 45], выражающие законы сохранения в простой алгебраической или интегральной формах. При этом для применения таких упрощенных соотношений в эксперименте должны быть обеспечены условия автомодельности соответствующих режимов течения.

При распространении по веществу стационарного ударного разрыва на его фронте выполняются законы сохранения массы, импульса и энергии [45], которые связывают кинематические параметры — скорость ударной волны  $D$  и массовую скорость вещества за ее фронтом  $u$  с термодинамическими величинами — удельной внутренней энергией  $E$ , давлением  $p$  и удельным объемом  $V$ :

$$\begin{aligned} V/V_0 &= (D - u)/D; p = p_0 + Du/V_0, \\ E - E_0 &= 1/2(p + p_0)(V_0 - V). \end{aligned} \quad (1.1)$$

где индексом 0 отмечены параметры покоящегося вещества перед фронтом ударной волны.

Эти уравнения позволяют по регистрации любых двух из пяти параметров  $E$ ,  $p$ ,  $V$ ,  $D$ ,  $u$ , характеризующих ударный разрыв, найти гидро- и термодинамические характеристики ударно сжатого вещества. Наиболее легко и точно базисными методами измеряется скорость ударной волны  $D$ . Выбор второго регистрируемого параметра зависит от конкретных условий эксперимента. Обычно это массовая скорость ударного разрыва  $u$  [43, 45] или плотность ударно-сжатой плазмы,  $\rho = V^{-1}$  [118].

Анализ погрешностей соотношений (1.1) показывает, что в случае сильно сжимаемых («газовых») сред в качестве второго параметра целесообразно выбрать плотность ударно-сжатого вещества. В настоящее время разработана методика таких измерений, основанная на фиксации поглощения «мягкого» рентгеновского излучения плазмой цезия, аргона и воздуха [116]. При меньшей сжимаемости вещества (конденсированные среды) приемлемые точности обеспечиваются путем регистрации массовой скорости движения  $u$ . Таким образом исследовались состояния вырожденной плазмы металлов и плотной бозе-газовской плазмы аргона и ксенона [43, 45, 116, 117].

В экспериментах по фиксации кривых изоэнтропического расширения ударно-сжатого вещества, состояния в центрированной волне разгрузки опи-

связываются интегралами Римана [45]:

$$V = V_H + \int_p^{P_H} \left( \frac{du}{dp} \right)^2 dp; \quad E = E_H - \int_p^{P_H} \left( \frac{du}{dp} \right)^2 dp, \quad (1.2)$$

которые вычисляются вдоль измеренной изэнтропы,  $P_s = P_s(u)$ .

Проводя регистрации при различных начальных условиях и интенсивностях ударных волн и волн расширения, можно определить калорическое уравнение состояния  $E = E(p, V)$  в области  $p$ - $V$ -диаграммы, перекрытой адиабатами Гюгонио или/и Пуассона. В выполненных к настоящему времени экспериментах по динамическому воздействию на плазму, изменение интенсивности ударных волн осуществлялось варьированием мощности источников возбуждения — изменением давления толкающего газа, типов ВВ, метательных устройств и плотностью мишеней. Кроме того, использовались разнообразные способы изменения параметров исходных состояний: изменение начальных температур и давлений (плазма инертных газов, цезия, жидкости), применение мелкодисперсных мишеней в целях увеличения эффектов необратимости [43, 45].

Таким образом, динамические методы диагностики, основываясь на общих законах сохранения, позволяют свести задачу определения калорического уравнения состояния  $E = E(p, V)$  к измерению кинематических параметров движения ударных волн и контактных поверхностей, т.е. к регистрации расстояний и времен, что может быть выполнено с большой точностью. Внутренняя энергия  $E$ , однако, не является термодинамическим потенциалом по отношению к переменным  $p$ ,  $V$ , и для построения замкнутой термодинамики системы необходима дополнительная зависимость температуры от параметров состояния  $T(p, V)$ . В оптически прозрачных и изотропных средах (газы, ионные кристаллы) температура может быть измерена совместно с другими параметрами ударного сжатия. Конденсированные среды, и в первую очередь металлы, как правило, непрозрачны, так что световое излучение ударно-сжатой среды недоступно для прямой регистрации.

Термодинамически полное уравнение состояния может быть построено непосредственно по результатам динамических измерений без введения априорных соображений о свойствах и характере исследуемого вещества [118], с использованием процедуры Ферми, исходя из первого закона термодинамики и известной из эксперимента зависимости  $E = E(p, V)$  — см. подробней [116, 118]. Эта применяемая в динамических экспериментах методика построения уравнения состояния вещества свободна от каких-либо ограничивающих предположений о свойствах, характере и фазовом составе исследуемого вещества, так как основана на самых общих законах сохранения (1.1) и первом законе термодинамики. При этом в эксперименте должны быть обеспечены условия стационарности и одномерности течения ударно-сжатой среды для того, чтобы можно было пользоваться законами сохранения в простом алгебраическом (1.1) или интегральном (1.2) видах.

Важно, что ударная волна не только сжимает, но и разогревает вещество до высоких температур, что особенно важно для получения плазмы —

ионизованного состояния материи. При экспериментальном изучении сильнонеидеальной плазмы в настоящее время используется ряд динамических методов (рис. 1.19).

Ударное сжатие вещества в твердом или жидком исходном состоянии дает возможность получать за фронтом ударной волны состояния (адиабаты Гюгонио  $H$ , рис. 1.19) неидеальной вырожденной (статистика Ферми) и классической (статистика Больцмана) плазмы, сжатой до максимальных давлений,  $p \approx 4$  Гбар, и температур  $T \approx 10^7$  К [79, 119], при которых удельная плотность внутренней энергии плазмы сравнима с ядерной плотностью энергии, а температуры близки к условиям, когда энергия и давление равновесного излучения начинают играть заметную роль в суммарной термодинамике таких экзотических состояний.

Для снижения эффектов необратимого нагрева целесообразно использовать сжатие вещества последовательностью падающих и отраженных ударных волн [12, 53, 120–122]. В результате такое многоступенчатое сжатие ( $H_k$ ) становится близким к более «мягкому» изэнтропическому сжатию ( $S1$ ), позволяя получить значительно более высокие (в 10–50 раз) степени сжатия и более (примерно в 10 раз) низкие температуры по сравнению с однократным ударно-волновым сжатием. Многократное ударное сжатие было успешно применено для экспериментального изучения ионизации плазмы давлением [12, 120, 121] и диэлектризации вещества [53] при мегабарных давлениях. Квазиадиабатическое сжатие было также реализовано при взрывном высокосимметричном цилиндрическом сжатии водорода и инертных газов [12]. В опытах по «мягкому» адиабатическому сжатию плазмы в работах [123, 124] использовалось взрывное обжатие образцов мегагауссным магнитным полем.

В другом предельном случае, когда необходимо получить плазму высоких температур, можно осуществлять ударно-волновое сжатие мишеней пониженной (по сравнению с твердотельной) плотности — пористых металлов (кривая  $H_m$  [43, 45, 116, 125]) или аэрогелей [126] — кривая  $H_a$  на рис. 1.19. Это позволяет резко увеличить эффекты необратимости ударного сжатия и тем самым поднять энтропию и температуру сжатого состояния.

Ударное сжатие благородных газов и насыщенных паров щелочных металлов падающими  $H_1$  и отраженными  $H_2$  (рис. 1.22) ударными волнами дает возможность изучить плазму в области с развитой термической ионизацией [116, 118, 127–133].

Адиабатическое расширение вещества (кривые  $S$  на рис. 1.19), предварительно сжатого ударной волной до мегабарных давлений позволяет исследовать интересную область плазменных параметров, расположенных между твердым телом и газом, включая область перехода металл–диэлектрик и высокотемпературную часть кривой кипения металлов с их критической точкой [116, 117, 134, 135].

Ввиду значительной величины энергии металлической связи, параметры критических точек металлов чрезвычайно высоки (для Al это 4,5 Кбар, 8000 К, для W — 15 Кбар, 21000 К) и недоступны для техники статических экспериментов. Поэтому до последнего времени характеристики критических точек были измерены только у трех из всех металлов, составляющих 80% элементов Периодической системы [116]. С другой стороны, из-за высоких

критических температур металлов, сопоставимых с их потенциалом ионизации; они в околокритическом состоянии испаряются непосредственно в ионизованное состояние, а не в газ, как это имеет место для остальных химических элементов.

Это обстоятельство может приводить к экзотическим «плазменным» фазовым переходам, предсказанным в случае металлизации Ландау и Зельдовичем [136] и другими теоретиками для сильно сжатых кулоновских систем (см. [137–141] и содержащиеся там ссылки). Экспериментальный поиск этих экзотических плазменных фазовых переходов является сегодня одной из интереснейших проблем динамической физики высоких плотностей энергии. Обнаруженный недавно резкий (5 порядков величины) рост электропроводности [12, 120, 121, 133, 142, 143] и адиабатической сжимаемости [144] неидеальной водородной и дейтериевой плазмы, подтвержденные квантовомеханическими расчетами методом Монте-Карло [141], по-видимому, свидетельствуют об экспериментальной реализации такого плазменного фазового перехода.

Не рассматривая здесь иных методов генерации и исследования физических свойств вещества в экстремальных условиях (см. монографии [1, 2, 5, 6]), перейдем к обсуждению экспериментального изучения суперэкстремальных ( $p \approx 10^{30}$  бар,  $T \approx 200$  МэВ,  $\rho \approx 10^{15}$  г/см<sup>3</sup>) состояний ядерной материи, генерируемой при столкновении ядер, разогнанных в ускорителях до релятивистских скоростей [1, 2].

Эти опыты направлены на поиск новых частиц (рис. 1.20), на экспериментальное исследование фундаментальных проблем физики высоких энергий при столкновениях адронов, которые сопровождаются образованием сверхплотного ядерного вещества — кварк-глюонной плазмы (КГП).

Если фиксация рождения новых частиц в этих опытах может быть осуществлена прямым или косвенным детектированием, то получение информации о равновесных (или квазиравновесных) свойствах сжатой ядерной материи сопряжено со значительными трудностями, так как речь идет о предельно малых пространственных и временных масштабах, делающими невозможными применение динамических методов, основанных на законах сохранения в автомодельных течениях вида (1.1)–(1.2). В условиях эксперимента RHIC продольное лоренцево сокращение (рис. 1.11, 1.18) размеров сталкивающихся ядер порядка 100. Характерный объем области  $U + U$  столкновений составляет примерно 3000 фм<sup>3</sup>, в нем содержится порядка 10000 кварков и глюонов, а характерное время столкновения  $\tau_0 \approx 0,2\text{--}2$  фм/с  $\approx (5\text{--}50) \cdot 10^{-25}$  с. По этой причине часть высокоэнергетических процессов происходит, по видимому, уже в разлетающемся веществе после того, как ядерные сгустки пролетели друг сквозь друга.

Во время столкновения и по мере расширения и охлаждения ядерной материи возникающие кварки и глюоны термализуются (время  $\tau_{eq} \leq 1$  фм/с  $\approx 3 \times 10^{-24}$  с) и могут прийти в локальное термодинамическое равновесие за время жизни плазмы  $\tau_0 \approx (2) R/c \approx 10$  фм/с. В этом случае среда придет в гидродинамическое движение, фиксация которого несет экспериментальную информацию о свойствах адронного или кварк-глюонного вещества, а также

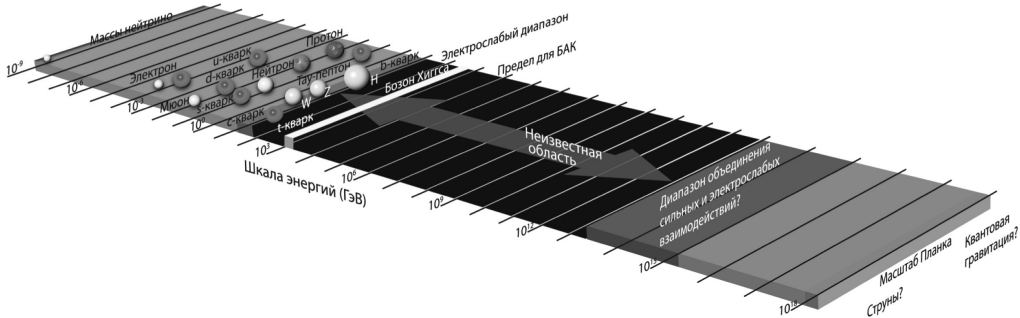


Рис. 1.20. Проблема иерархии частиц [145]

о границах взаимного перехода, который согласно квантовой электродинамике должен происходить при плотности энергии порядка  $\text{ГэВ/фм}^3$ .

В этих экзотических условиях отсутствия прямых средств диагностики свойств сжатой барионной материи, как и для макроскопической электромагнитной плазмы также используются динамические методы, когда о свойствах среды судят по ее гидродинамическим проявлениям — по динамике разлета продуктов релятивистских столкновений, по диссипативным свойствам гидродинамического течения и т. п. [1, 2]. В рамках этого формализма предполагается, что сталкивающиеся ядра могут быть описаны как сплошная среда с соответствующим УРС, движение которой подчиняется уравнениям релятивистской гидродинамики. Картина такого рода представления ядерных столкновений изображена на рис. 1.21, которая иллюстрирует элегантную идею Штокера [146] об образовании маховских ударных волн, по свойствам которых можно судить о характеристиках сжатого ядерного вещества.

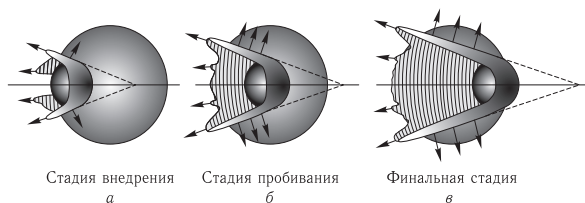


Рис. 1.21. Образование маховских ударных волн в ядерном веществе [146] при столкновении легкого ядра (слева) и «тяжелого»

Другим ярким примером проявления ультраэкстремальных состояний являются нейтронные звезды [3].

Ввиду крайне малых размеров, измерять параметры нейтронных звезд крайне затруднительно, здесь удастся измерить их массу по движению в составе звездных структур [3]. Кроме того размеры нейтронных звезд определяют по сдвигу линий их излучения. Это доступная для наблюдений информация вместе с радиационными характеристиками в разных длинах волн и составляет ту основу, на которой базируются весьма изощренные модели УРС этих суперэкстремальных объектов. Перейдем теперь к более детальному изложению моделей состояния в отдельных участках фазовых диаграмм [1, 2].

Кроме радиопульсаров, нейтронные звезды являются также источниками [147] мощного излучения рентгеновского (рентгеновские пульсары),  $\gamma$ - и рентгеновских вспышек (магнитары), постоянного рентгеновского излучения, исходящего из центров остатков взрыва сверхновых, очень слабых оптических звезд. Изучение нейтронных звезд решает и дает возможность решить ряд фундаментальных проблем физики высоких плотностей энергии. Это прежде всего исследование уравнения состояния сверхплотного вещества,  $\rho > \rho_0$ .

По мере продвижения вверх по шкале давлений и температур вещество (его состав, структура, свойства и т. п.) претерпевает радикальные изменения от идеального газа невзаимодействующих нейтральных частиц, исчерпывающим образом описываемого классической статистической физикой Больцмана до экзотических форм барионной и кварк-глюонной материи, отдельные проявления которой только сейчас начинают фиксироваться в рекордных по параметрам экспериментах по столкновению релятивистских ионов [1, 2], а также проявляться при интерпретации астрономических наблюдений так называемых «компактных» (нейтронных и «странных» звезд) [3].

В последнем случае речь идет о гигантских давлениях  $p \approx 10^{25}$  Мбар и  $T \approx 10^9 - 10^{11}$  К, через которые прошла наша Вселенная в результате своей эволюции спустя миллионные доли секунды после Большого взрыва (рис. 1.11, 1.14, 1.20, 1.22) [1, 2]. В этот момент термодинамические параметры вещества принимали максимально мыслимые, на основе наших современных физических представлений и значения. Эти доступные для современных физических представлений ультракстремальные параметры вещества определяются так называемыми планковскими величинами [46, 48], являющимися комбинациями фундаментальных констант: постоянной Планка  $\hbar$ , скорости света  $c$ , гравитационной постоянной  $G$  и постоянной Больцмана  $k$ :

- длина  $l_P = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} = \frac{\hbar}{m_P c} \approx 1,62 \cdot 10^{-33}$  см;
- масса (так называемая масса «максимона»)  $m_P = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} = 2,18 \cdot 10^{-5}$  г;
- время  $t_P = \frac{l_P}{c} = \frac{\hbar}{m_P c^2} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^5}} = 5,39 \cdot 10^{-44}$  с;
- температура  $T_P = \frac{m_P c^2}{k} = \sqrt{\frac{\hbar c^5}{G k^2}} = 1,42 \cdot 10^{32}$  К;
- энергия  $W_P = m_P c^2 = \frac{\hbar}{t_P} = \sqrt{\frac{\hbar c^5}{G}} = 1,96 \cdot 10^9$  Дж;
- плотность  $\rho_P = \frac{m_P}{l_P^3} = \frac{\hbar t_P}{l_P^5} = \frac{c^5}{\hbar G^2} = 5,16 \cdot 10^{93}$  г/см<sup>3</sup>;
- сила  $F_P = \frac{W_P}{l_P} = \frac{\hbar}{l_P t_P} = \frac{c^4}{G} = 1,21 \cdot 10^{44}$  Н;
- давление  $p_P = \frac{F_P}{l_P^2} = \frac{\hbar}{l_P^3 t_P} = \frac{c^7}{\hbar G^2} = 4,63 \cdot 10^{113}$  Па;
- заряд  $q_P = \sqrt{\hbar c^4 \pi \epsilon_0} = 1,78 \cdot 10^{-18}$  Кл;
- мощность  $P_P = \frac{W_P}{t_P} = \frac{\hbar}{t_P^2} = \frac{c^5}{G} = 3,63 \cdot 10^{52}$  Вт;
- круговая частота  $\omega_P = \sqrt{\frac{c^5}{\hbar G}} \approx 1,85 \cdot 10^{43}$  с<sup>-1</sup>;

- электрический ток  $I_P = \frac{q_P}{t_P} = \sqrt{\frac{c^6 4\pi\epsilon_0}{G}} = 3,48 \cdot 10^{25} \text{ А};$
- напряжение  $V_P = \frac{W_P}{q_P} = \frac{\hbar}{t_P} = \sqrt{\frac{c^4}{G 4\pi\epsilon_0}} = 1,05 \cdot 10^{27} \text{ В};$
- импеданс  $Z_P = \frac{V_P}{I_P} = \frac{\hbar}{q_P^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c} = \frac{Z_0}{4\pi} = 29,98 \text{ Ом};$
- напряженность электрического поля  $E_P = \frac{V_P}{l_P} = \frac{1}{G} \sqrt{\frac{c^7}{4\pi\epsilon_0 \hbar}} = 6,4 \times 10^{59} \text{ В/см};$
- напряженность магнитного поля  $H_P = \frac{1}{G} \sqrt{\frac{c^9 4\pi\epsilon_0}{\hbar}} = 2,19 \cdot 10^{60} \text{ А/м} = 1,74 \cdot 10^{62} \text{ Э}.$

Такие суперэкстремальные параметры материи, при которых известные нам законы физики, по видимому уже не работают, могли бы реализоваться в начале Большого взрыва или в сингулярности при коллапсе черных дыр. Для этой области обсуждаются физические модели, предполагающие, что наше пространство имеет более трех пространственных измерений, а обычное вещество находится в трехмерном многообразии — на «бране» [148], вложенной в это многомерное пространство.

Возможности современного эксперимента в области физики высоких энергий, которые пока еще очень далеки от этих планковских значений, позволяют выяснить свойства элементарных частиц при энергиях вплоть до 0,1–10 ТэВ и расстояниях вплоть до  $10^{-16}$  см. Важным событием стал запуск в ЦЕРНе Большого адронного коллайдера (ЛHC), на котором стала доступной область энергий тераэлектронвольтного масштаба.

Если не выходить [1, 2] за пределы нерелятивистской относительно нуклонов области энергии,  $mc^2 \approx 1 \text{ ГэВ}$ , то мы получим граничную температуру  $10^9 \text{ эВ}$ , плотность энергии  $10^{37} \text{ эрг/см}^2$  и давление порядка  $10^{25} \text{ Мбар}$ , хотя в ядрах нейтронных и кварковых звезд и на ранних нано- и пикосекундных этапах эволюции Вселенной возникали, возможно, более экстремальные состояния материи. Поэтому нейтронные и странные звезды, а также черные дыры являются реальными астрофизическими объектами, дающими хоть и косвенную, но все же содержательную информацию о термодинамике ультраэкстремальных состояний, необходимую для построения УРС вещества.

Наши экспериментальные возможности, хотя и очень скромны, но, позволяют лишь немного «заглянуть» в эту область экстремальных астрофизических состояний — рис. 1.1, 1.22.

По видимому, уравнение состояния материи на инфляционной стадии развития Вселенной  $p = -\rho c^2$  при «планковских» условиях является наиболее «экстремальным» УРС, которое удастся сформулировать для описания рекордно экстремальных состояний материи.

Согласно теории Большого взрыва [1, 2] момент рождения Вселенной — это эпоха рождения классического пространства-времени. В момент рождения Вселенной плотность  $\rho$  и температура  $T$  вещества достигали планковских

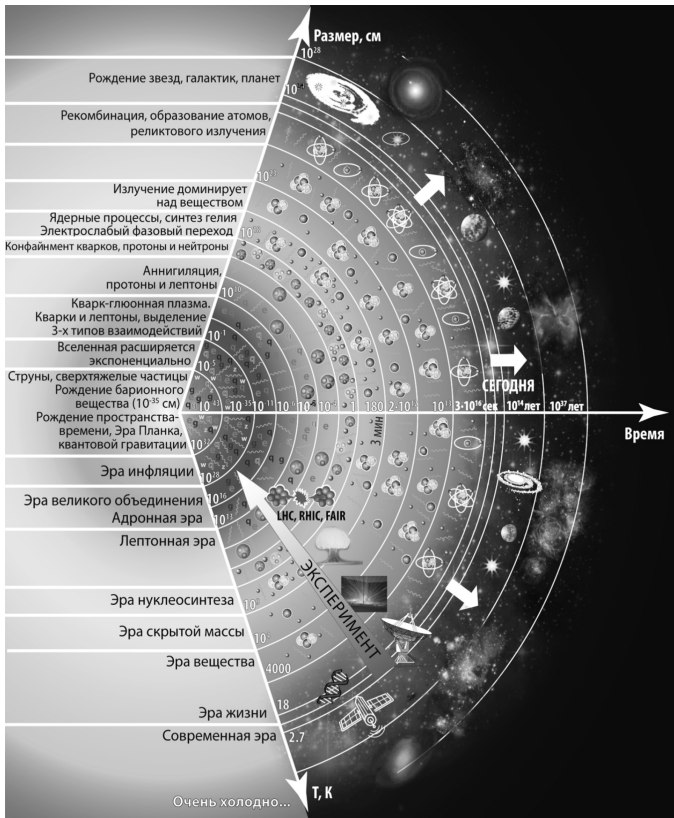


Рис. 1.22. Шкала времени после Большого взрыва

значений:  $\rho_p \approx 10^{93}$  г/см<sup>3</sup>,  $T_p \approx 1,3 \cdot 10^{32}$  К, когда гравитационное взаимодействие по силе сравнимо с прочими (сильным, слабым, электромагнитным) и его необходимо рассматривать с учетом квантования.

Гигантских энергий, которые дают современные ускорители, явно недостаточно для того, чтобы воспроизвести в лабораториях условия, соответствующие области параметров «Великого объединения», порядка  $10^{15}$  ГэВ (рис. 1.22). Для этого понадобился бы ускоритель размером с Солнечную

систему. С момента Большого взрыва Вселенная непрерывно расширяется, температура вещества понижается, а объем растет. При описании рождения Вселенной используются самые общие идеи о квантовой эволюции Вселенной равна нулю. Это значит, что вся Вселенная может родиться без затрат энергии с исходным геометрическим размером порядка планковского.

По мере расширения Вселенная заимствует энергию из гравитационного поля, чтобы создать больше вещества. Положительная энергия вещества в точности уравновешивается отрицательной гравитационной энергией, так что полный энергобаланс равен нулю.

Через  $10^{-43}$ – $10^{-42}$  секунды после рождения классического пространства-времени во Вселенной начинается инфляционная стадия (рис. 1.22), которая длится до стадии Великого объединения, порядка  $10^{-35}$  с, когда рождается реликтовое излучение. Анализ инфляционной стадии требует экстраполяции известных нам физических законов на 30 порядков по пространственному масштабу, за которой, по-видимому, находится граница человеческого философствования и, как отмечал еще великий христианский богослов античности Тертуллиан, именно на подобной границе начинается богословие.

Инфляционная стадия характеризуется предельно сильным отрицательным давлением,  $p = -\rho c^2$ , при котором меняются сами законы обычной гравитационной физики. Вещество в этом состоянии не источник притяжения, а источник отталкивания. Возможно, что очень ранняя Вселенная была заполнена не только частицами, но и временной формой темной энергии (полем инфлатона) с очень высокой плотностью. Эта энергия и вызвала расширение Вселенной с очень большим ускорением, после чего распалась, образовав высокотемпературную плазму, позже разделившуюся на привычную нам материю и излучение. Остался только слабый след темной материи, который стал значимым лишь в современную эпоху. Во время инфляционной стадии объем Вселенной увеличивается на много порядков (в некоторых моделях примерно в  $10^{1000}$  раз), так что вся Вселенная оказывается в одной причинно-связанной области. Здесь становятся равными кинетическая энергия расширения Вселенной и ее потенциальная энергия. Во время этой стадии возникают физические условия, которые позже приводят к расширению Вселенной по закону Хаббла.

Поскольку на этой стадии скорость изменения расстояния между частицами пропорциональна самому расстоянию, а скорость расширения  $R \sim e^{bt}$ , то эту стадию называют инфляционной, так как при инфляции такому же закону экспоненциального роста подчиняется рост денежной массы.

В отличие от взрыва химических взрывчатых веществ, где разлет продуктов детонации связан с градиентом давления, в случае Большого взрыва источником разлета является отрицательное давление в однородной среде — антигравитация, существовавшая на начальных стадиях существования Вселенной.

Во время инфляции гравитационные силы отталкивания разгоняют частицы, так что дальше они движутся по инерции, формируя хаббловский закон расширения.

Далее мы перейдем к более детальному анализу различных участков фазовой диаграммы вещества и их термодинамическому описанию.

## Список литературы

1. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
2. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
3. *Haensel P., Potekhin A. Y., Yakovlev D. G.* Neutron stars 1: Equation of state and structure. — N.Y.: Springer, 2007. — V. 326 of Astrophysics and Space Science Library.
4. *Киржниц Д.* Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489.
5. *Fortov V., Yakubov I., Khrapak A.* Physics of Strongly Coupled Plasma. — Oxford: Clarendon Press, 2006.
6. *Фортвов В., Храпак А., Якубов И.* Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
7. *Drake R.* High-Energy-Density Physics. — Berlin-Heidelberg: Springer, 2006.
8. Magnetodynamic Scaling: From Astrophysics to the Laboratory / *Ryutov D. D., Remington B. A., Robey H. F., Drake R. P.* // Phys. Plasmas. — 2001. — V. 8, No. 5. — P. 1804.
9. *March N. H., Tosi M. P.* Introduction to liquid state physics. — New Jersey, London, Singapore, Hong Kong: World Scientific, 2002.
10. *Фортвов В.* Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества // УФН. — 2007. — Т. 177, No. 4. — С. 347.
11. Frontiers in High Energy Density Physics / Ed. by D. Henderson. — Washington: National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
12. Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений / *Фортвов В., Терновой В., Жерноклетов М. и др.* // ЖЭТФ. — 2003. — Т. 124, № 2. — С. 288.
13. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В. Фортова. — М.: Наука, 2000.
14. *Loubeyre P., Occelli F., Toulec R. L.* Optical Studies of Solid Hydrogen to 320 GPa and Evidence for Black Hydrogen // Nature. — 2002. — V. 416, No. 6881. — P. 613.
15. Calculation of the Shock Hugoniot of Deuterium at Pressures above 1 Mbar by the Path-Integral Monte Carlo Method / *Filinov V. S., Levashov P. R., Bonitz M., Fortov V. E.* // Plasma Physics Reports. — 2005. — V. 31, No. 8. — P. 700.
16. Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas / *Filinov V. S., Bonitz M., Levashov P. et al.* // J. Phys. A: Math. Theor. — 2003. — V. 36, No. 22. — P. 6069.
17. Monte Carlo Results for the Hydrogen Hugoniot / *Bezkravnyy V., Filinov V. S., Krempp D. et al.* // Phys. Rev. E. — 2004. — V. 70, No. 5. — P. 057401.
18. Complex (Dusty) Plasma: Current Status, Open Issues, Perspectives / *Fortov V., Ivlev A., Khrapak S. et al.* // Phys. Rep. — 2005. — V. 421, No. 1. — P. 1.
19. Пылевая плазма / *Фортвов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А. и др.* // УФН. — 2004. — Т. 174, No. 5. — С. 495.
20. *Dubin D., O'Neil T.* Trapped Nonneutral Plasmas, Liquids and Crystals (the Thermal Equilibrium States) // Rev. Modern Phys. — 1999. — V. 71. — P. 87.
21. *Schatz T., Schramm U., Habs D.* Crystalline Ion Beams // Nature. — 2001. — V. 412, No. 6848. — P. 717.
22. Cooling and Heating of Crystalline Ion Beams / *Schramm U., Schatz T., Busmann M., Habs D.* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2003. — V. 36, No. 3. — P. 561.

23. *Pieranski P.* Colloidal crystals // *Contemporary Physics*. — 1983. — V. 24, No. 1. — P. 25.
24. *Russel W. B., Savill D. A., Schowalter W. R.* Colloidal Dispersions. — Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
25. *Murray C. A., Wenk R. A.* Observation of Order-Disorder Transitions and Particle Trajectories in a Model One-Component Plasma: Time Resolved Microscopy of Colloidal Spheres. // *Strongly Coupled Plasma Physics / Ed. by H. Van Horn, S. Ichimaru*. — Rochester: University Rochester Press, 1993. — P. 367.
26. *Шашкин А. А.* Переходы металл — диэлектрик и эффекты электрон-электронного взаимодействия в двумерных электронных системах // *УФН*. — 2005. — Т. 175, № 2. — С. 139.
27. Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropic Compression at Megabar Pressures / *Fortov V. E., Ilkaev R. I., Arinin V. A. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — V. 99, No. 18. — P. 185001.
28. *Фортов В.* Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества. — М.: Букос, 2005.
29. Численное исследование неустойчивости ударных волн в термодинамически неидеальных средах / *Конюхов А., Лихачев А., Опарин А. и др.* // *ЖЭТФ*. — 2003. — Т. 125, № 4. — С. 927.
30. *Faber T.* Fluid Dynamics for Physicists. — Cambridge: Cambridge University Press, 1977.
31. *Прохоров А., Фортов В., Анисимов С.* Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях // *УФН*. — 1984. — Т. 142, № 3. — С. 395.
32. *Kruer W.* The Physics of Laser Plasma Interaction. — Reading MA: Addison-Wesley, 1988.
33. *Adzeni S., ter Vehen J. M.* The Physics of Inertial Fusion. — Oxford: Clarendon Press, 2004.
34. *Lindle I.* Inertial Confinement Fusion. — N.Y.: Springer, 1998.
35. *Pukhov A.* Strong field interaction of laser radiation // *Rep. Prog. Phys.* — 2003. — V. 66, No. 1. — P. 47.
36. Measurements of Energetic Proton Transport through Magnetized Plasma from Intense Laser Interactions with Solids / *Clark E. L., Krushelnick K., Davies J. R. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 84, No. 4. — P. 670.
37. Forward Ion Acceleration in Thin Films Driven by a High-Intensity Laser / *Maksimchuk A., Gu K. F. S., Umstadter D., Bychenkov V. Y.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 84, No. 18. — P. 4108.
38. Effect of Plasma Scale Length on Multi-MeV Proton Production by Intense Laser Pulses / *Mackinnon A. J., Borghesi M., Hatchett S. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — V. 86, No. 9. — P. 1769.
39. *Mourou G. A., Tajima T., Bulanov S. V.* Optics in the relativistic regime // *Rev. Mod. Phys.* — 2006. — V. 78, No. 2. — P. 1804.
40. Positron Production in Multiphoton Light-by-Light Scattering / *Burke D. L., Field R. C., Horton-Smith G. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — V. 79, No. 9. — P. 1626.
41. *Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В.* Статистическая модель вещества // *УФН*. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3.
42. Развитие в России динамических методов исследований высоких давлений / *Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Урлин В. Д. и др.* // *УФН*. — 1999. — Т. 169, № 3. — С. 323.

43. *Алтишулер Л. В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. — 1965. — Т. 85, № 2. — С. 197.
44. *Hemley R., Mao H.* // Int. School of Physics «Enrico Fermi», Course CXLVII, High Pressure Phenomena / Ed. by R. J. Hemley, G. Chiarotti, M. Bernasconi, L. Ulivi. — Amsterdam, Oxford: IOS Press, 2001. — P. 3.
45. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
46. *Гинзбург В.* О физике и астрофизике. — М.: Бюро Квантум, 1995.
47. *Vacca J.* The World's 20 Greatest Unsolved Problems. — New Jersey: Prentice Hall-PTR, 2004.
48. *Окунь Л.* Лептоны и кварки. — 2 изд. — М.: Наука, 1990.
49. *Кон В.* Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // УФН. — 2002. — Т. 172, № 3. — С. 336.
50. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. — М.: Наука, 1964. — Т. VII, XI.
51. *Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г.* Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // УФН. — 1970. — Т. 100, № 2. — С. 193.
52. *Гандельман Г. М., Ермаченко В. М., Зельдович Я. Б.* // ЖЭТФ. — 1963. — Т. 44. — С. 386.
53. Аномальная электропроводность лития при квазиизэнтропическом сжатии до 60 ГПа (0,6 Мбар). Переход в молекулярную фазу? / *Фортвов В. Е., Якушев В. В., Каган К. Л. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1999. — Т. 70, № 9. — С. 620.
54. Anomalous resistivity of lithium at high dynamic pressure / *Fortov V. E., Yakushev V. V., Kagan K. L. et al.* // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — V. 74, № 8. — P. 458.
55. Lithium at high dynamic pressure / *Fortov V. E., Yakushev V. V., Kagan K. L. et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2002. — V. 14, No. 44. — P. 10809.
56. *Киржниц Д. А.* Приложения к теории сильносжатого вещества // Полевые методы теории многих частиц. — М.: Госатомиздат, 1963.
57. *Киржниц Д. А.* // ЖЭТФ. — 1958. — Т. 35. — С. 1545.
58. *Калиткин Н. Н.* // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 1534.
59. Solar plasma: calculation of thermodynamic functions and equation of state / *Gryaznov V. K., Ayukov S. V., Baturin V. A. et al.* // J. Phys. A. — 2006. — V. 39, No. 17. — P. 4459.
60. *Brush S. G., Sahlin H. L., Teller E.* Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I // J. Chem. Phys. — 1966. — V. 45, No. 6. — P. 2102.
61. *Киржниц Д. А.* // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 503.
62. *Mestel L., Ruderman M. A.* The energy content of a white dwarf and its rate of cooling // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 1967. — V. №. 136. — P. 27.
63. *Van Horn H. M.* Crystallization of White Dwarfs // Ap. J. — 1968. — V. 151. — P. 227.
64. *Шишов С. М.* Плавление при высоких давлениях // УФН. — 1968. — Т. 96, № 3. — С. 467.
65. *Жарков В. Н., Калинин В. А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. — М.: Наука, 1968.

66. *Van Horn H. M.* Crystallization of a classical, one-component coulomb plasma // *Phys. Lett. A.* — 1969. — V.28, No.10. — P.706.
67. *Carr W. J.* Energy, Specific Heat, and Magnetic Properties of the Low-Density Electron Gas // *Phys. Rev.* — 1961. — V.122, No.5. — P.1437.
68. *Dugdale J. S., Franck J. P.* The Thermodynamic Properties of Solid and Fluid Helium-3 and Helium-4 above 3 degrees K at High Densities // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.* — 1964. — V.257, No.1076. — P.1.
69. *Абрикосов А. А.* // *ЖЭТФ.* — 1960. — Т.39. — С.1797.
70. *Nozières P., Pines D.* Correlation Energy of a Free Electron Gas // *Phys. Rev.* — 1958. — V.111, No.2. — P.442.
71. *De Wette F. W.* Note on the Electron Lattice // *Phys. Rev.* — 1964. — V.135, No.2A. — P.A287.
72. *Van Horn H.* Thesis. — Cornell University, CRSR 211, 1965.
73. Spin Up in Neutron Stars: The Future of the Vela Pulsar / *Baym G., Pethick C., Pines D., Ruderman M.* // *Nature.* — 1969. — V.224. — P.872.
74. *Франк-Каменецкий Д. А.* Физические процессы внутри звезд. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 1959.
75. Enhancement of fusion rates due to quantum effects in the particles momentum distribution in nonideal plasma media / *Fisch N., Gladush M. G., Petrushevich Y. V. et al.* // *Eur. Phys. J. D.* — 2012. — V.66, No.6. — P.154.
76. *Salpeter E. E., van Horn H. M.* Nuclear Reaction Rates at High Densities // *Ap. J.* — 1969. — V.155. — P.183.
77. *Wildhack W. A.* The Proton-Deuteron Transformation As a Source of Energy in Dense Stars // *Phys. Rev.* — 1940. — V.57, No.2. — P.81.
78. *Зельдович Я. Б.* // *ЖЭТФ.* — 1957. — Т.33. — С.991.
79. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества / *Аврорин Е. Н., Водолаза Б. К., Симоненко В. А., Фортвов В. Е.* // *УФН.* — 1993. — Т.163, №5. — С.1.
80. *Зельдович Я. Б., Новиков И. Д.* Релятивистская астрофизика. — М.: Наука, 1967.
81. *Имшенник В. С., Надежин Д. К.* // *Астрон. ж.* — 1965. — Т.42. — С.1159.
82. *Амбарцумян В. А., Саакян Г. С.* // *Вопросы космогонии.* — 1963. — Т.9. — С.91.
83. *Steron A. G. W.* Neutron Stars, Lectures, Preprint. — 1969.
84. *Амбарцумян В. А., Саакян Г. С.* // *Астрон. ж.* — 1960.
85. *Sameron A. G.* Neutron Star Models. // *Ap. J.* — 1959. — V.130. — P.884.
86. *Уилер Д.* Гравитация и относительность. — М.: Мир, 1965.
87. *Langer W. D., Rosen L. C.* Hyperonic Equation of State // *Astr. Space Sci.* — 1970. — V.6. — P.217.
88. *Райорден М., Зейц У.* Первые микросекунды // *В мире науки.* — 2006. — №8. — С.21.
89. *Gyulassy M.* Quark Gluon Plasmas: Femto Cosmology with A+A @ LHC. — Presented at the ExtreMe Matter Institute EMMI Kick-Off Meeting & Symposium. 2008. GSI, Darmstadt.
90. *Baym G.* Matter under extreme conditions. — 2007. — July.
91. *Hands S.* The phase diagram of QCD // *Journal of Contemporary Physics.* — 2001. — V.42, No.4. — P.209.
92. *Новиков И. Д.* Отзвуки Большого взрыва (наблюдения реликтового излучения)(Сессия РАН 28.02.2001) // *УФН.* — 2001. — Т.171, №8. — С.859.

93. *Rubakov V.* Introduction to Cosmology // Proceedings of Science RTN(2005)003. — 2005.
94. *Glendenning N.* Compact Stars, Nuclear Physics, Particle Physics and General Relativity. — N.Y.: Springer, 2000.
95. *Shuryak E. V.* Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter // Physics Reports. — 1980. — V. 61, No. 2. — P. 71.
96. *Shuryak E. V.* Quark-gluon plasma and hadronic production of leptons, photons and pions // Phys. Lett. B. — 1978. — V. 78, No. 1. — P. 150.
97. *Kalashnikov O. K., Klimov V. V.* Phase transition in the quark-gluon plasma // Phys. Lett. B. — 1979. — V. 88, No. 3-4. — P. 328.
98. *Kapusta J. I.* Quantum chromodynamics at high temperature // Nucl. Phys. B. — 1979. — Mar. — V. 88, No. 3-4. — P. 461.
99. *Collins J. C., Perry M. J.* Superdense Matter: Neutrons or Asymptotically Free Quarks? // Phys. Rev. Lett. — 1975. — V. 34, No. 21. — P. 1353.
100. *Baym G., Chin S. A.* Can a neutron star be a giant MIT bag? // Phys. Lett. B. — 1976. — V. 62, No. 2. — P. 241.
101. *Freedman B. A., McLerran L. D.* Fermions and gauge vector mesons at finite temperature and density. III. The ground-state energy of a relativistic quark gas // Phys. Rev. D. — 1977. — V. 16, No. 4. — P. 1169.
102. *Chapline G., Nauenberg M.* Asymptotic freedom and the baryon-quark phase transition // Phys. Rev. D. — 1977. — Jul. — V. 16, No. 2. — P. 450.
103. *Gyulassy M., McLerran L.* New forms of QCD matter discovered at RHIC // Nuclear Physics A. — 2005. — V. 750, No. 1. — P. 30.
104. *Fodor Z., Katz S. D.* Critical point of QCD at finite T and  $\mu$ , lattice results for physical quark masses // Journal of High Energy Physics. — 2004. — V. 2004, No. 04. — P. 050.
105. The QCD Equation of State at Finite  $T, \mu$  on the Lattice / *Csikor F., Egri G., Fodor Z. et al.* // Prog. Theor. Phys. Supp. — 2004. — No. 153. — P. 93-105.
106. Azimuthal Anisotropy at the Relativistic Heavy Ion Collider: The First and Fourth Harmonics / *Adams J., Adler C., Aggarwal M. M. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 92, No. 6. — P. 062301.
107. *Sorensen P. R.* Kaon and Lambda Production at Intermediate  $P_T$ : Insights into the Hadronization of the Bulk Partonic Matter Created in Au + Au Collisions at RHIC. Ph.D. Thesis. — 2003.
108. Particle-Type Dependence of Azimuthal Anisotropy and Nuclear Modification of Particle Production in Au + Au Collisions at  $sNN = 200$  GeV / *Adams J., Adler C., Aggarwal M. M. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 92, No. 5. — P. 052302.
109. Elliptic Flow of Identified Hadrons in Au+Au Collisions at  $sNN=200$  GeV / *Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2003. — V. 91, No. 18. — P. 182301.
110. Directed and elliptic flow of charged pions and protons in Pb+Pb collisions at 4A and 158A GeV / *Alt C., Anticic T., Baatar B. et al.* // Phys. Rev. C. — 2003. — V. 68, No. 3. — P. 034903.
111. *Mrowczynski S., Thoma M. H.* What Do Electromagnetic Plasmas Tell Us about the Quark-Gluon Plasma? // Annual Review of Nuclear and Particle Science. — 2007. — V. 57, No. 1. — P. 61.
112. *Hemley R. J., Ashcroft N. W.* The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // Physics Today. — 1998. — V. 51, No. 8. — P. 26.
113. *Nellis W.* Dynamic Compression of Materials: Metallization of Fluid Hydrogen at High Pressures // Reports on Progress in Physics. — 2006. — V. 69, No. 5. — P. 1479.

114. Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кардиоллы, Г. Кнопфеля. — М.: Мир, 1969.
115. *Langanke L. A FAIR Chance for Nuclear Astrophysics, Kik-Off Event and Symposium on the Physics at FAIR.* — 2007.
116. *Фортвов В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т.* Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
117. Shock Waves and Extreme States of Matter / *Fortov V. E., Altshuler L. V., Trunin R. F., Funtikov A. I.* // High Pressure Shock Compression of Solids, VII / Ed. by R. Graham. — N.Y.: Springer, 2004.
118. *Фортвов В. Е., Красников Ю. Г.* О построении термодинамически полного уравнения состояния неидеальной плазмы по динамическим экспериментам // ЖЭТФ. — 1970. — Т. 59, № 1. — С. 1645.
119. Ударная сжимаемость алюминия при давлениях  $p > 1$  Гбар / *Владимиров А. С., Волошин Н. П., Ногин В. Н. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1984. — Т. 39, № 2. — С. 69.
120. *Weir S. T., Mitchell A. C., Nellis W. J.* Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar) // Phys. Rev. Lett. — 1996. — V. 76, No. 11. — P. 1860.
121. *Ternovoi V. Y., Fortov V. E. et al.* Thermodynamic Properties and Electric Conductivity of Hydrogen under Multiple Shock Compression to 150 GPa // Physica B: Condens. Matter. — 1999. — V. 265, No. 1/4. — P. 6.
122. Измерение электропроводности серы при сверхвысоких динамических давлениях / *Набатов С. С., Дремин А. Н., Постнов В. И., Якушев В. В.* // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 29, № 7. — С. 407.
123. Observation of Electrical Conductivity of Isentropically Compressed Hydrogen at Megabar Pressures / *Hawke P. S., Burgess T. J., Duerre D. E. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 1978. — V. 41, No. 14. — P. 994.
124. *Pavlovski A. I., Boriskov G. V. et al.* Isentropic Solid Hydrogen Compression by Ultrahigh Magnetic Field Pressure in Megabar Range // Megagauss Technology and Pulsed Power Applications / Ed. by C. M. Fowler et al. — N.Y., London: Plenum, 1987. — P. 255.
125. Ударно-волновое сжатие сильнонеидеальной плазмы металлов и ее термодинамика / *Грязнов В. К., Жерноклетов М. В., Иосилевский И. Л. и др.* // ЖЭТФ. — 1998. — Т. 114, № 4. — С. 1242.
126. Генерация неидеальной плазмы путем ударно-волнового сжатия высокопористого SiO<sub>2</sub>-аэрогеля / *Грязнов В. К., Николаев Д. Н., Терновой В. Я. и др.* // Химическая физика. — 1998. — Т. 17, № 2. — С. 33.
127. *Fortov V., Bepalov V. et al.* Experimental Study of Optical Properties of Strongly Coupled Plasmas // Strongly Coupled Plasma Physics / Ed. by S. Ishimaru. — Elsevier, 1990. — P. 571.
128. *Kulish M., Gryaznov V. et al.* Experimental Study of Al Line in Dense Xenon Plasma // XXIII Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases. — V.I. — Toulouse: 1997. — P. 212.
129. *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортвов В. Е.* Термодинамика сильно разогретой плазмы мегабарного диапазона давления // Письма в ЖЭТФ. — 1982. — Т. 8, № 22. — С. 1378.
130. *Минцев В. Б., Фортвов В. Е.* Взрывные ударные трубы // ТВТ. — 1982. — Т. 20, № 4. — С. 745.
131. *Ломакин Б. Н., Фортвов В. Е.* Уравнение состояния неидеальной цезиевой плазмы // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 63, № 7. — С. 1972.
132. Термодинамика неидеальной плазмы цезия / *Бушман А. В., Ломакин Б. Н., Сеченов В. А. и др.* // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69, № 11. — С. 1624.

133. Электропроводность неидеальной плазмы водорода в мегабарном диапазоне динамических давлений / *Фортвов В. Е., Терновой В. Я., Квитов С. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1999. — Т. 69, № 12. — С. 874.
134. Изэнтропическое расширение ударносжатого свинца / *Фортвов В. Е., Леонтьев А. А., Дремин А. Н., Першин С. В.* // Письма в ЖЭТФ. — 1974. — Т. 20, № 1. — С. 30.
135. *Леонтьев А. А., Фортвов В. Е.* О плавлении и испарении металлов в волне разгрузки // ПМТФ. — 1974. — № 3. — С. 162.
136. *Зельдович Я. Б., Ландау Л. Д.* Корреляция между жидкими и газообразными состояниями металлов // ЖЭТФ. — 1944. — Т. 14. — С. 32.
137. *Wigner E.* On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. — 1934. — V. 46, No. 11. — P. 1002.
138. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas / *Ebeling V., Foerster A., Fortov V. et al.* — Berlin-Stuttgart: Teubner Verlagsgesellschaft, 1991.
139. *Норман Г. Э., Старостин А. Н.* Термодинамика сильно неидеальной плазмы // ТВТ. — 1970. — Т. 8, № 2. — С. 413.
140. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: The plasma phase transition // Phys. Rev. Lett. — 1989. — V. 62, No. 20. — P. 2397.
141. Phase Transition in Strongly Degenerate Hydrogen Plasma / *Filinov V. S., Fortov V. E., Bonitz M., Levashov P. R.* // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — V. 74, No. 7. — P. 422.
142. *Nellis W. J.* Dynamic compression of materials: metallization of fluid hydrogen at high pressures // Rep. Progr. Phys. — 2006. — V. 69, No. 5. — P. 1195.
143. Экспериментальное измерение сжимаемости, температуры и поглощения света в ударно-сжатом плотном газообразном дейтерии / *Гришечкин С. К., Груздев С. К., Грязнов В. К. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 6. — С. 452.
144. *Mochalov M. A., Zhernokletov M. V. et al.* Study of Thermodynamical and Optical Properties of Deuterium under Shock and Adiabatic Compression // In Theses Int. Conf. on Strongly Coupled Coulomb Systems, P. 35. Moscow. — 2005.
145. *Квиг К.* Грядущая революция в физике частиц // В мире науки. — 2008. — No. 5. — С. 26.
146. Shock waves in nuclear matter — proof by circumstantial evidence / *Stocker H., Hofmann J., Maruhn J., Greiner W.* // Progress in Particle and Nuclear Physics. — 1980. — V. 4. — P. 133.
147. *Истомин Я. Н.* Генерация электронно-позитронной плазмы в магнитосфере нейтронных звезд // УФН. — 2008. — Т. 178, № 8. — С. 880.
148. *Рубаков В. А.* Большие и бесконечные дополнительные измерения // УФН. — 2001. — Т. 171, № 9. — С. 913.

## УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

Газообразное и жидкое состояния вещества имеют наибольшее значение для повседневной жизни человека и занимают достаточно широкую часть фазовой диаграммы (рис. 2.1, 2.2) [1]. От твердого тела эти состояния вещества отделены резко выраженной фазовой границей плавления, не имеющей, согласно работе [2], критической точки. В области высоких температур и давлений газ и жидкость граничат с плазмой, которая возникает в результате термической ( $T$ -ионизация) или ионизацией давлением ( $p$ -ионизация). Граница здесь весьма условна и сильно зависит от квантово-химических особенностей конкретного вещества, — его потенциала ионизации, электронной структуры, размера атомов и т. д.

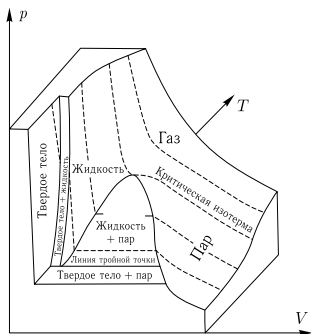


Рис. 2.1. Часть поверхности в  $(p, V, T)$  пространстве, представляющая уравнение состояния чистого вещества, с изотермами изображенными пунктиром. Эти области названы по физическому состоянию материала

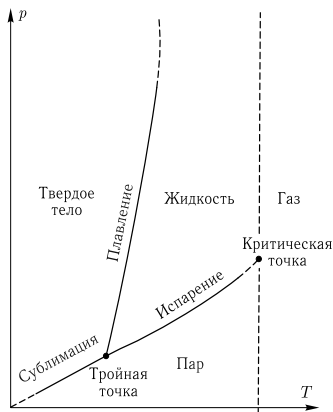


Рис. 2.2. Фазовая диаграмма чистого вещества, полученная путем проецирования  $pVT$ -поверхности, на  $(p, T)$  плоскость

Газообразное и жидкое состояния вещества характеризуются максимальной степенью неупорядоченности и отсутствием жесткости. Даже малые сдвиговые напряжения вызывают движения жидкости и газа, которые принимают форму сосуда в котором они находятся и оказывают сопротивление не изменению формы, а объема [1].

Еще более условна граница между жидкостью и газом. Она выражена для состояний,  $T < T_c$ ,  $p < p_c$ , ниже критических. Выше них различие отсутствует и вещество здесь носит название «плотный флюид», свойствам которого мы уделим в этой главе основное внимание.

## 2.1. Вириальные разложения

Если для малоплотного (идеального) газа уравнение состояния было найдено еще в начале XVIII века, то термодинамически полное описание жидкого состояния традиционно являлось наиболее трудным делом [3].

Дело в том, что в жидкости средняя энергия межчастичного взаимодействия сравнима с кинетической энергией движения частиц. Это обстоятельство вместе со структурной неупорядоченностью делает невозможным применение методов теории возмущений и затрудняет построение качественных моделей из-за малого количества измерений. Именно прогресс в экспериментальной технике, а также появление беспараметрических машинных методов Монте–Карло и молекулярной динамики вместе с методами интегральных уравнений определяют современный прогресс в описании термодинамики и структуры жидкого состояния вещества.

Модель идеального невырожденного газа является первой и наиболее простой аппроксимацией, применимой в области малых плотностей и невысоких температур, когда в системе еще не происходят процессы термической диссоциации и ионизации, а энергия взаимодействия между частицами мала по сравнению с их кинетической энергией. Наиболее распространенный способ учета этого взаимодействия состоит в использовании групповых разложений Майера [3, 4], что приводит к вириальному уравнению состояния [5]

$$p = \frac{NkT}{V} \sum_i \frac{N^i B_i(T)}{V^i} \quad (2.1)$$

где вириальные коэффициенты  $B_i(T)$  учитывают взаимодействие  $i$  частиц через потенциал  $\varphi_{ij}(r)$ . Вид и параметры потенциалов  $\varphi_{ij}$  выбираются из условия согласованного описания возможно более разнородной информации — данных по квантовомеханическим расчетам энергии связи, спектрам двухатомных молекул, опытов с молекулярными пучками, а также комплекса имеющихся теплофизических данных.

Анализ результатов такого рода описания системы, проведенный для благородных газов (например, с потенциалами «exp — 6», «12 — 6»), позволил определить численные параметры этих потенциалов и оптимальный вид [6]. Короткодействующий характер указанных потенциалов обеспечивает сходимость интегралов в  $B_i$ , однако практический расчет старших вириальных коэффициентов ограничен трудностями вычисления многократных интегра-

лов. В настоящее время проведен расчет семи первых вириальных коэффициентов для простейшего потенциала твердых сфер и нескольких низших коэффициентов для более реалистических потенциалов взаимодействия [6]. При конкретных вычислениях с ростом плотности характер сходимости разложения (2.1) резко ухудшается, что приводит к необходимости использования значительного числа членов ряда (2.1), содержащих неизвестные старшие вириальные коэффициенты. Подчеркнем, что сама сходимость вириального ряда доказана лишь для чрезвычайно разреженного газа.

В плотных схемах становятся существенными также эффекты неаддитивности межчастичного взаимодействия — их учет в рамках трехчастичного потенциала Аксельрода–Теллера (см. [6]),

$$\Delta\varphi_{123} = \nu(1 + 3 \cos \theta_{12} \cos \theta_{13} \cos \theta_{23})(r_{12}r_{13}r_{23})^{-3},$$

изменяет величину  $B_3$  аргона в критической точке на 40%. Данные обстоятельства ограничивают пределы применимости вириальных уравнений состояния со стороны высоких плотностей газа. Для этого случая предложены многочисленные эмпирические зависимости весьма сложного вида, осуществляющие детальную аппроксимацию экспериментальных данных и удобные для инженерных термодинамических расчетов.

## 2.2. Ближний порядок. Интегральные уравнения

В сильно сжатых газах энергия межчастичного взаимодействия оказывается сравнимой с кинетической энергией движения частиц, что практически соответствует жидкому состоянию [1, 3, 4], хотя разделение на жидкость и газ при сверхкритических температурах является, конечно, условным. В последнее время для описания таких ситуаций с большим успехом применяются физические модели, основанные на использовании интегральных уравнений и прямом численном моделировании (Монте–Карло, молекулярная динамика) сильно сжатых классических систем, которые будут рассмотрены ниже (гл. 5).

Отсутствие характерного для твердого тела дальнего порядка и сильное межчастичное взаимодействие крайне затрудняют теоретическое описание жидкого состояния, которое долгое время традиционно считалось трудным и наименее разработанным разделом статистической физики [1, 2]. Попытки применить к жидкости газовые представления оказались малосодержательными ввиду большого (2–3 порядка) различия плотностей этих фаз, что требует значительного числа известных вириальных коэффициентов в разложении типа (2.1). Даже если бы необходимые коэффициенты и удалось вычислить, то вопрос о сходимости ряда (2.1) при значениях плотности, соответствующих жидкой фазе, оставался бы открытым, так как имеющиеся доказательства сходимости вириального ряда относятся к пределу  $\rho \rightarrow 0$  [3, 6].

Плотность жидкости отличается от кристаллической на 10–20%, что объясняет относительный успех использования для ее описания твердотельных аппроксимаций.

Будучи окруженными соседями, атомы в плотной жидкости оказываются локализованными и совершают хаотические квазиколлебательные тепловые движения около части фиксированного положения с характерной частотой

$10^{12}$ – $10^{13}$  Гц, меняя в то же время это квазификсированное положение скачками. Указанные частоты близки к характерным частотам колебания атомов твердого тела или частотам колебательных возбуждений молекул, а характерные времена усреднений соответствуют наносекундному диапазону.

Это представление о локализации молекул жидкости в малой области пространства под действием среднего поля соседей лежит в основе решеточной модели, или модели свободного объема [1, 3, 7]. Естественно, что такой подход наиболее приемлем для описания сильно сжатой жидкости при низких температурах, когда кинетическая энергия составляет малую долю полной энергии, т.е. при условиях, вообще говоря, не соответствующих жидкому состоянию, когда эти величины сопоставимы между собой. Вследствие этого решеточная модель применима только к состояниям в непосредственной близости от кривой плавления, причем плавление проявляется в образовании многочисленных дефектов кристаллической решетки, как бы сильно искаженной в жидком состоянии [8].

Комбинация твердотельных и газовых представлений приводит к многоструктурной модели [3, 7], согласно которой реальная жидкость представляется как равновесная смесь газа и твердого тела, свойства которой описываются на языке бинарной функции распределения или статистической суммой с эмпирическим параметром, обеспечивающим интерполяцию между гармоническим кристаллом и идеальным газом. Сходные представления используются

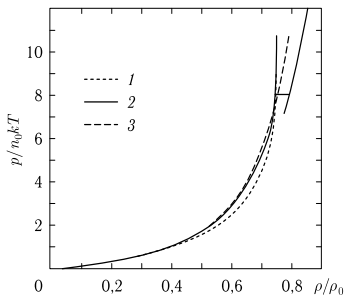


Рис. 2.3. Уравнение состояния системы твердых дисков [9]. Расчет: 1 — самосогласованная ячеечная модель, 2 — с учетом кластерных поправок, 3 — метод Монте-Карло

в ячеечной модели ([1, 7], гл. 3), согласно которой вся жидкость разбивается на молекулярные ячейки, заполненные в зависимости от термодинамических условий. Модели такого рода осуществляют лишь схематическое описание свойств реальной жидкости, но вследствие своей простоты могут быть эффективно использованы как элемент полуэмпирических моделей (гл. 9). Отметим также, что современное развитие методов расчета ячеечной модели [9] дало возможность аналитически единым образом описать свойства твердого тела и жидкости и явление плавления (рис. 2.3).

Совершенствование экспериментальной техники дифракционных измерений [1, 6] позволило получать важную информацию о структуре жидкости, что привело к более глубокому пониманию ее свойств. В соответствии с представлениями, полученными на основании опытов по упругому рассеянию рентгеновских лучей и тепловых нейтронов, в жидкости реализуется ближний порядок, описываемый бинарной функцией распределения  $g(r)$ , определяющей при заданном потенциале

межчастичного взаимодействия  $\varphi(r)$  все равновесные свойства жидкого состояния.

На рис. 2.4 из работы [1] приведены бинарные корреляционные функции кислородных молекул в воде (пунктир) и аргона (сплошные кривые). Несмотря на радикальное различие этих веществ, их корреляционные функции имеют много общего. Наличие ярко выраженного первого пика и затухание осцилляций  $g(r)$  с ростом  $r$  свидетельствуют о наличии ближнего порядка и потере трансляционной симметрии с ростом  $r$ . При этом амплитуда первого пика дает число ближайших соседей — для жидкого аргона это 10, а для кислорода, примерно, 4,5.

Крайне важно, что во всех жидкостях существует область «исключенного объема» при  $0 < r < 1$ , где  $g \simeq 0$ , занятая данной молекулой или атомом и недоступная для других атомов из-за сильного межатомного отталкивания, вызванного кулоновскими силами и принципом неопределенностей для связанных в атомах электронов. Эти силы отталкивания очень резко растут с расстоянием при  $r \rightarrow 0$  и могут быть аппроксимированы жесткой стенкой. Это приводит к весьма продуктивной теории жестких несжимаемых сфер. Именно наличие «исключенного объема» стало ключом к современному пониманию равновесных, структурных и транспортных свойств жидкого состояния [1].

Для предсказания термодинамического поведения жидкости, в зависимости от характера и деталей межмолекулярного взаимодействия, в статистической теории жидкого состояния решается задача о нахождении статистической суммы системы многих тел через так называемую парную корреляционную функцию частиц системы  $g(r)$  и потенциал взаимодействия  $\varphi(r)$ . Функция  $g(r)$  определяет вероятность обнаружить центры двух частиц на взаимном расстоянии  $r$  при заданной температуре  $T$  и плотности частиц  $n$  системы в целом. Функция  $g(r)$  описывает внутреннюю упорядоченность в системе и ее зависимость от термодинамических условий. Если функция  $g(r)$  известна, то для одноатомных и однокомпонентных систем с парным взаимодействием между частицами термодинамические функции можно найти из хорошо известных точных решений уравнений для давления, полной энергии и сжимаемости (см. (2.15)–(2.17)).

Таким образом, для простых жидкостей функция  $g(r)$  одновременно описывает их структуру и термодинамические свойства.

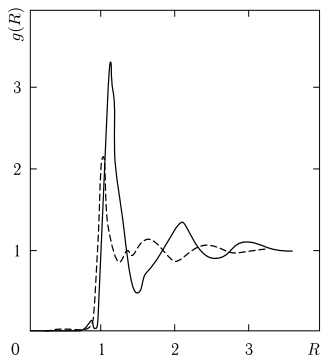


Рис. 2.4. Функции радиального распределения атомов кислорода в воде (пунктирная линия) и жидкого аргона (сплошная линия) вблизи точек замерзания и на расстоянии  $R = r/\sigma$  — масштабируется по диаметру Ван-дер-Ваальса (2,82Å в воде и 33,4Å в аргоне)

В теории жидкости особое место занимает такие подходы, как поиски приближенных интегральных уравнений для  $g(r)$  при заданном потенциале взаимодействия  $\varphi(r)$ .

Статистическая теория позволяет связать эти характеристики нелинейными интегральными уравнениями, конструируемыми на основании различных гипотез об относительной роли ближних и дальних взаимодействий в системе [1, 3, 9, 10]. В свою очередь, беспараметрические методы Монте–Карло и молекулярной динамики, а в последнее время и прямые экспериментальные измерения этих величин в опытах с «пылевой (dusty)» плазмой [11, 12], дают возможность при заданном потенциале провести точный расчет  $g(r)$  и проверить условия применимости различных интегральных уравнений.

Описание жидкости определяется, таким образом, выбором адекватного потенциала  $\varphi(r)$ , причем сделанные приближения удается контролировать экспериментально, так как структурный фактор — это фурье-образ бинарной функции распределения

$$S(q) = 1 + n \int [g(r) - 1] e^{iqr} dr,$$

является наблюдаемой величиной при дифракционных рентгеновских или нейтронных измерениях, а в опытах с «пылевой» плазмой появляется возможность прямого измерения  $g(r)$  путем оптических наблюдений. Схема описания оказывается замкнутой и сводится к анализу влияния свойств потенциала на структурные и равновесные свойства неупорядоченной системы.

Идейной основой статистического описания жидкостей [1, 3] является цепочка бесконечного числа интегро-дифференциальных уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) [1], связывающая  $s$  и  $s + 1$  частичные корреляционные функции, определяющие вероятность нахождения  $s$  частиц в выбранных координатах  $\mathbf{r}_s$  при заданном потенциале  $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$ :

$$-kT\nabla_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s) = g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)\nabla_1\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s) + \rho \int g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_{s+1})\nabla_1\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_{s+1})d(\mathbf{r}_{s+1}). \quad (2.2)$$

Являясь, в принципе, точной, эта бесконечная цепочка уравнений громоздка и малоприспособна для реальных расчетов. Поэтому для «размыкания» этой цепочки применяют так называемое суперпозиционное приближение (или гипотезу Кирквуда), когда трехчастичная корреляционная функция представляется как произведение двухчастичных [1, 3, 13]:

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot g(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \cdot g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3). \quad (2.3)$$

Эта гипотеза радикально упрощает систему (2.2) и приводит к семейству интегро-дифференциального уравнения для бинарной корреляционной функции  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , через которую определяется затем вся термодинамика системы [1]. Запишем это семейство уравнений в форме Орнштейна–Цернике [1] для симметричного потенциала  $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(r)$ :

$$h(r) = C(r) + \int dr' h(|r - r'|)C(r'), \quad (2.4)$$

$$\ln g(r) = -\frac{1}{kT}\varphi(r) + h(r) - C(r) + B(r), \quad (2.5)$$

где  $g(r) = h(r) + 1$ . Так называемая прямая функция распределения имеет вид

$$C(r) = \frac{1}{2\pi^2 n} \int_0^\infty \left[ \frac{S(q) - 1}{S(q)} \right] q \sin(qr) dq. \quad (2.6)$$

Приближение

$$B(r) = 0 \quad (2.7)$$

соответствует «гиперцепному» приближению.

Приближению Перкуса-Йевики соответствует аппроксимация

$$B(r) = \ln(1 + C(r) - h(r)) - C(r) + h(r). \quad (2.8)$$

Определяющим для создания современных моделей жидкости стал экспериментально установленный факт слабой зависимости структуры жидкости от температуры при фиксированной плотности [3, 6]. Близость структур жидких металлов, ионных систем и диэлектриков, имеющих существенно различные силы притяжения, свидетельствует, в свою очередь, о малой роли этих сил в формировании равновесных свойств жидкости. Эти обстоятельства указывают на ведущий вклад отталкивающей части потенциалов, в то время как влияние сил притяжения и учет температурных эффектов приводит в плотной жидкости к поправкам, которые можно учесть по теории возмущений [14], на основе вариационного метода [15] или в приближении хаотических фаз [10].

В свою очередь для модельного описания сил отталкивания целесообразно использовать простейший потенциал твердых сфер радиусом  $\sigma$ ,

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq \sigma, \\ 0, & r > \sigma, \end{cases} \quad (2.9)$$

характеризующий предельное состояние сильно сжатой и разогретой жидкости. Модель твердых сфер, будучи простейшей нетривиальной моделью жидкого состояния, стала весьма популярным объектом теоретического анализа и для применения техники интегральных уравнений, и для численных методов и в настоящее время изучена максимально подробно [9, 10].

Начиная с пионерских работ [16, 17] и [18] стало ясно, что модель твердых сфер, предельно упрощая межчастичное взаимодействие и сводящая отталкивание к бесконечному потенциалу в точке контакта, способна описать геометрические особенности коллективного поведения в плотной жидкости, которые, как оказалось, во многом ответственны за структурные свойства и фазовую границу жидкого состояния [1].

Эта модель приводит к наличию недоступного для других частиц «исключенного» объема (рис. 2.4), который уже не может быть занят другими частицами жидкости. Действительно, в заданном объеме  $V$  можно разместить только конечное число сферических атомов радиусом  $\sigma$ , объем которых равен  $V_c$ . Для гексогональной плотноупакованной структуры и кубической гранецентрированной  $V_c = \sigma^3/\sqrt{2}$ . Отношение объема сфер  $V_c$  к полному

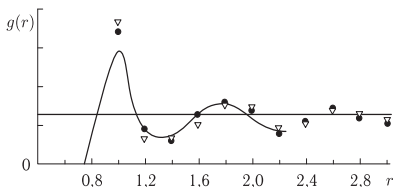


Рис. 2.5. Функция радиального распределения  $g(r)$  в зависимости от приведенного расстояния  $r/\sigma$  для модели случайной упаковки [16, 17] (●) и [18] (▽), по отношению к схематическому графику дифракционных данных по жидкостям типа аргона. Для твердосферной жидкости  $g(r) = 0$  для  $r/\sigma < 1$  [19]

объему  $V$  при нерегулярной упаковке составляет 0,64, что на 14% меньше плотности упаковки, равной 0,7405 [1].

Структурные данные моделей [16–18] с учетом термических эффектов сравниваются с аргоном на рис. 2.5, где видно, что модели твердых сфер воспроизводят эффект «исключенного» объема и ближний порядок в плотной жидкости.

Существенно, что для потенциала (2.9) получено точное аналитическое решение уравнения Перкуса–Йевики, которое является наилучшим интегральным уравнением для описания систем с короткодействующим отталкиванием и широко применяется для расчета свойств реальных жидкостей. Наличие в решении свободного параметра — плотности упаковки  $\eta = 4\pi\sigma^2 N/3V$  — позволяет, используя различные способы его определения, успешно осуществлять описание структурных характеристик простых жидкостей и жидких металлов [1, 3, 9, 10].

Расчеты различными методами систем с потенциалом (2.9) выполнены в настоящее время во всем диапазоне жидкого состояния и могут быть наилучшим образом представлены аналитически Паде-аппроксимацией Карнахана–Старлинга [1]:

$$\frac{F_{TC}}{NkT} = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad (2.10)$$

$$\frac{p_{TC}V}{NkT} = \frac{1 + \eta + \eta^2 + \eta^3}{(1 - \eta)^3}.$$

Характер описания данных аппроксимацией (2.10) представлен на рис. 2.6.

Любопытно, что численные расчеты по модели (2.9) при плотностях, близких к плотной упаковке сфер,  $\eta = \frac{4\pi\delta^3 n}{3} \lesssim 1$ , показали наличие структурных аномалий и тенденцию к появлению в системе дальнего порядка, что связывается [20] с кристаллизацией, имеющей в этом случае геометрический характер.

Появление фазового перехода «затвердевание» в твердосферной модели жидкости явилось наиболее удивительным результатом первых расчетов ансамбля твердых тел методом молекулярной динамики [21]. Поскольку внут-

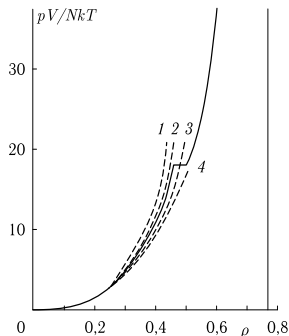


Рис. 2.6. Модели для жидкой ветви изотермы твердосферной системы. Сплошная линия результат моделирования данных, она хорошо воспроизводится уравнением состояния Карнахана–Старлинга. Пунктирной линией — 2 представлено уравнение состояния сжимаемости Перкуса–Иевики. Другие штриховые линии являются альтернативными оценками изотермы жидкости [1]

решения энергия в такой системе является чисто кинетической, такой переход носит энтропийный характер. При этом соответствующий скачок объема в молекулярно-динамических расчетах составляет 5%. Кривая плавления в модели твердых сфер имеет положительный наклон  $dp/dT > 0$ , а скачок энтропии  $\Delta S = \text{const}$ , что характерно для последующих измерений скачка энтропии оптическими методами в мегабарном диапазоне давлений [22].

Мы оставим описание машинных методов расчета термодинамики ансамблей многих тел до гл. 5, где рассмотрим современные квантово-механические версии этих подходов. Здесь мы приводим траектории частиц [1], рассчитанные методом молекулярной динамики для твердого (рис. 2.7а) и жидкого (рис. 2.7б) состояний, наглядно иллюстрирующие характер движения частиц в этих фазах.

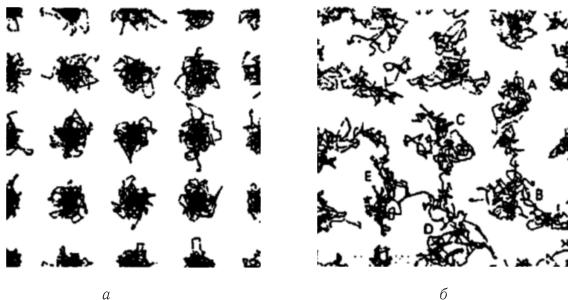


Рис. 2.7. Сравнительное моделирование поведения 32 твердых сфер: поведение траекторий частиц в (а) контрастирует с их поведением в жидкости (б). Обратите внимание на обмен частиц в (б): А и В, С, D и E [19]

Дальнейший прогресс в описании свойств жидкой фазы был достигнут с помощью модели мягких сфер, использующей степенной потенциал отталкивания,

$$\varphi(r) = \begin{cases} \varepsilon(\sigma/r)^n, & r \leq \sigma, \\ 0, & r > \sigma, \end{cases} \quad (2.11)$$

с которым также были проведены расчеты равновесных свойств методами Монте-Карло и молекулярной динамики [14, 23–25]. Результаты описываются аппроксимационной формулой

$$\frac{F_{MC} - F_0}{Nk_B T} = \frac{1}{6}(n+4)\eta^{n/9} \left( \frac{\varepsilon}{k_B T} \right)^{1/3},$$

причем степень потенциала  $n$  является дополнительным свободным параметром модели. Степенной потенциал отталкивания, аналогично потенциалу твердых сфер, приводит к потенциалу для плавления [24, 25], характеристики которого сильно зависят от значения  $n$ . Заметим в этой связи, что численное моделирование свойств реальных систем с использованием более сложных потенциалов типа Леннард-Джонса [23], ступенчатого и с прямоугольной ямой [26, 27], позволило получить кривые плавления и испарения, а также качественно описать изоструктурные электронные и полиморфные фазовые переходы в твердом теле (см. гл. 8).

В дальнейшем, в гл. 4, 9, мы используем модель «мягких» сфер (2.11) для описания свойств сильно сжатой плазмы конденсированных плотностей.

Комбинация модели твердых сфер (2.9) и приближения среднего поля составляют основу модифицированной модели жидкого состояния [1, 28], в которой свободные параметры определяются на основе экспериментальных значений энергии сублимации и положения первого пика структурного фактора жидкого металла, в точке плавления. Эта модель жидкого состояния, как и ее предшественник — модель Ван-дер-Ваальса, является качественной и не дает детального описания тонких характеристик жидкости. Совпадение расчета с экспериментом можно существенно улучшить, привлекая

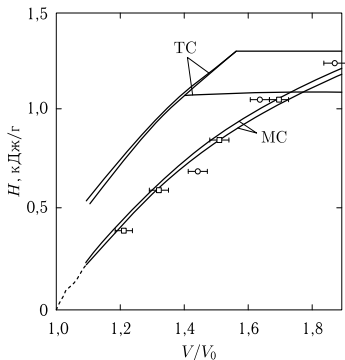


Рис. 2.8. Описание моделью твердых (ТС) и мягких (МС) сфер опытов по электровзрыву урановых проволочек под давлением [29, 30]. Значки — эксперимент, штриховая линия — статистические данные, сплошные — расчет

модель мягких сфер (2.11) и вводя дополнительно подгоночные параметры в модель среднего поля [29–31]. Пример такой аппроксимации представлен на рис. 2.8, где для выбора параметров уравнения состояния использованы

результаты экспериментов по электровзрыву урановых проволочек под давлением и свойства урана при нормальном давлении. Модифицированные модели Ван-дер-Ваальса [28, 31] в равной мере применимы для расчета термодинамических свойств плотной газовой фазы и имеют асимптотику идеального газа, что позволяет успешно использовать их при построении широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния (гл. 9).

Несмотря на предельные упрощения, модели твердых или мягких сфер правильно учитывают основные качественные особенности многочастичных взаимодействий в жидкости и поэтому удовлетворительно описывают термодинамические и структурные свойства жидкой фазы. Это дает возможность применять эти модели в качестве нулевого приближения, с последующим использованием теории возмущений [1, 9, 10] для учета деталей реального потенциала межчастичного взаимодействия

Этот учет деталей реального потенциала межчастичного взаимодействия проводится в рамках термодинамической теории возмущений, приближения хаотических фаз или на основе вариационного метода теории возмущений. Вариационный метод оказывается удобным способом расчета термодинамики конкретных жидкостей в широком интервале параметров, особенно эффективным при описании свойств плотной жидкой фазы. Метод основан на использовании, при нахождении свободной энергии Гельмгольца  $F(V, T)$  системы частиц с произвольным потенциалом взаимодействия  $\varphi(r)$ , неравенства Гиббса–Боголюбова:

$$F \leq F_0(\lambda) + \frac{n}{2} \int [\varphi(r) - \varphi_0(r)] g_0(r, \lambda) d^3r,$$

где  $F_0$  и  $g_0$  — свободная энергия и парная корреляционная функция исходной системы с потенциалом межчастичного взаимодействия  $\varphi_0(r)$ . Уравнение состояния произвольной системы определяется путем усреднения возмущения по структурным характеристикам  $\lambda$  исходного приближения, согласно условию  $(\partial F / \partial \lambda)_{V, T} = 0$ . В качестве нулевого приближения целесообразно выбирать систему твердых сфер, для которой имеются аналитические выражения, определяющие свободную энергию и парную корреляционную функцию. Это позволяет проводить в явном виде расчет термодинамических характеристик для случая произвольного потенциала межчастичного взаимодействия. В качестве минимизирующего параметра  $\lambda$  в этом случае служит радиус твердых сфер  $\sigma$ . Однако при большой плотности использование в качестве исходной модели твердых сфер приводит к существенным ошибкам за счет слишком сильного отталкивания частиц на малых расстояниях. Более реалистичным здесь является выбор в качестве модели нулевого приближения «мягкого» степенного потенциала отталкивания, обычно  $\varphi(r) = C/r^{12}$  [1]. Использование для исходного приближения модели твердых тел или мягких сфер позволяет с хорошей точностью получать уравнения состояния жидких инертных или молекулярных газов и простых металлов.

Развитие вариационного метода теории возмущений для расчета уравнений состояния жидких металлов привело к использованию в качестве нулевого приближения результатов, полученных методом Монте–Карло для однокомпонентной плазмы. Модель однокомпонентной плазмы основана на

численном моделировании простейшей системы точечных зарядов с кулоновским взаимодействием, расположенной для обеспечения ее устойчивости на однородном фоне компенсирующего заряда противоположного знака. В этом случае существуют аналитические выражения для  $F_0$ , причем минимизирующей величиной является параметр кулоновской неидеальности ( $\Gamma = e/kTr_{WZ}$ ), где среднее межчастичное расстояние  $r_{WZ} = (3/4\pi n)^{1/3}$ . Сопоставление результатов расчета уравнений состояния, выполненных с использованием в качестве нулевого приближения систем твердых или мягких сфер и однокомпонентной плазмы показали [1], что для жидкостей со слабо выраженным отталкиванием (щелочные металлы, расплавы солей, сплавы) наиболее приемлемым является модель однокомпонентной плазмы. Следует указать, что в окончательное выражение для уравнения состояния жидких металлов, помимо определенного с помощью вариационного метода конфигурационного члена, в энергию должны быть добавлены слагаемые, учитывающие энергию кулоновского взаимодействия и кинетическую энергию частиц в системе, суммарное значение которых при высокой температуре становится существенным.

Первоначально использованный при описании свойств простых жидкостей в около критических условиях [15], вариационный принцип теории возмущений на основе системы твердых сфер был применен для расчета термодинамики жидких простых металлов и сплавов [32], однокомпонентной плазмы [29, 30] и плотной частично ионизованной плазмы [33].

Применение данного способа описания позволило успешно проводить вычисления характеристик жидкой фазы металлов от состояний при нормальном давлении до состояний плотной полностью ионизованной плазмы. На рисунке 2.9 показаны результаты ударно-волновых экспериментов и расчетные ударные адиабаты натрия и алюминия. Отметим, что расчеты вариационным методом не только описывают экспериментальные данные, но и дают хорошее совпадение с результатами более строгих теоретических моделей в неисследованной экспериментально области сверхвысоких давлений и температур [33].

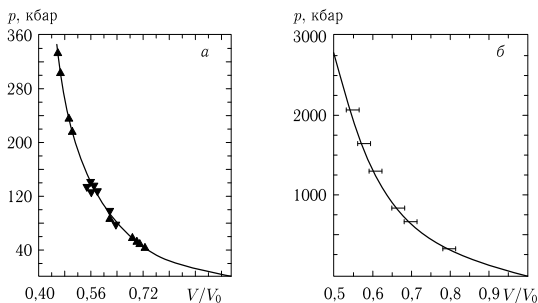


Рис. 2.9. Ударные адиабаты натрия (а) и алюминия (б) [9]. Сплошные линии — расчет вариационным методом теории возмущений, значки — эксперимент

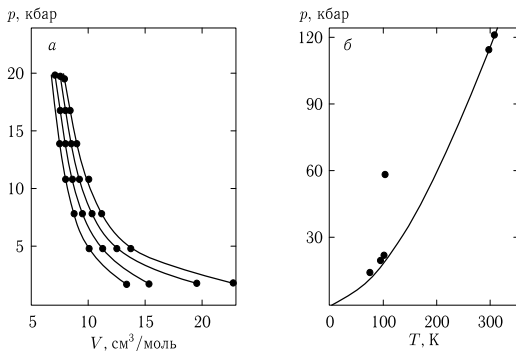


Рис. 2.10. Уравнение состояния жидкой фазы (а) и кривая плавления (б) гелия [37]. Экспериментальные данные — сплошные линии (а) и значки (б); температуры на изотермах равны 75, 150, 225 и 300 К

В дальнейшем метод был обобщен на случай использования в качестве нулевого приближения более реалистической при существенных сжатиях модели мягких сфер [14], что дало возможность успешно описать свойства жидких газов — ксенона [34], аргона [35], водорода, дейтерия [36] и гелия [37]. На основе расчетов вариационным методом термодинамических характеристик жидкой фазы водорода, дейтерия и гелия и уравнения состояния твердой фазы в квазигармоническом приближении было определено положение кривых плавления этих элементов [36, 37]. При расчетах в жидкой фазе учитывались квантовые поправки, для твердой фазы вычисления проводились с учетом эффектов ангармонизма. На рис. 2.10 приведено сопоставление расчетных и экспериментальных данных для гелия в жидкой фазе и на кривой плавления [37]. Из рисунка следует хорошее совпадение результатов расчета с экспериментом во всей исследованной области; случай водорода и дейтерия характеризуется аналогичной точностью описания [36].

Развитие вариационного метода теории возмущений для расчета характеристик жидких металлов привело к использованию в качестве исходного приближения теории возмущений результатов, полученных методом Монте-Карло для однокомпонентной плазмы. Сравнение расчетов для различных версий вариационного метода, развитых на основе систем твердых, мягких сфер или однокомпонентной плазмы показало [38], что для случая моделирования свойств лития наилучшим является описание с помощью характеристик однокомпонентной плазмы. Результаты аналогичного сравнения [39] между системой твердых сфер и однокомпонентной плазмой в качестве нулевых приближений при моделировании термодинамики жидких натрия и алюминия свидетельствуют о том, что для оптимального описания натрия также более предпочтительной является модель однокомпонентной плазмы, однако для алюминия лучшее совпадение с экспериментальными данными дает расчет

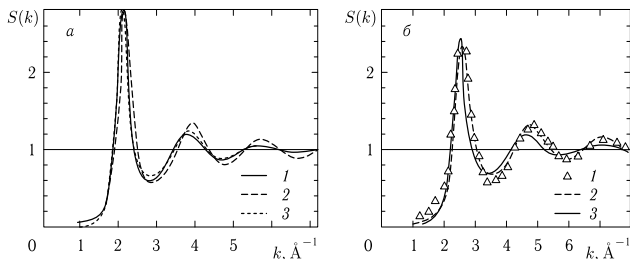


Рис. 2.11. Структурный фактор жидких натрия (а) и алюминия (б) [39]. а)  $T = 173 \text{ K}$ , данные эксперимента (эксперимент — 1) и расчет вариационным методом на основе твердых сфер (ТС,  $\eta = 0,47$  — 2) и однокомпонентной плазмы (ОКП,  $\Gamma = 156$  — 3); б)  $T = 933 \text{ K}$ , эксперимент — 1, ТС ( $\eta = 0,44$ ) — 2, ОКП ( $\Gamma = 119$ ) — 3

с использованием модели твердых сфер (рис. 2.11). Объяснением этому служит большая жесткость ионного остова алюминия, что вообще свойственно поливалентным металлам. Тем не менее результаты [39] подтвердили, что для систем с мягким отталкиванием (щелочные металлы, расплавы солей, сплавы) более приемлемой для использования вариационного метода теории возмущений является модель однокомпонентной плазмы.

Применение аппарата теории возмущений при вычислении свойств плотной жидкой фазы сильно затрудняется неаддитивностью сил взаимодействия и необходимостью учета многочастичных взаимодействий. Поскольку точный вид потенциала взаимодействия в большинстве случаев заранее не известен, в работах [40–42] была предложена своеобразная форма теории возмущений, использующей в качестве нулевого приближения холодную кривую твердого тела, эффективно учитывающую неаддитивные силы. При этом энергия жидкости выражается через переменные, характеризующие ближний порядок, а усреднение ведется по холодной кривой, взятой из эксперимента или машинного расчета. Вычисленные по модели скорректированных жестких сфер [40–42] термодинамические и структурные характеристики жидкости для потенциалов взаимодействия различного вида показали хорошее совпадение с расчетами методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Модель оказалась также эффективной при описании термодинамических свойств реальных жидкостей в широком интервале параметров и дает совпадающие с данными экспериментов результаты при низких [43] и высоких [44] давлениях (рис. 2.12). Любопытно отметить, что правомерность такого подхода [40–42] независимо подтвердилась экспериментальными результатами — полученные из опытных данных уравнения состояния жидкой и твердой фазы щелочных металлов дают совпадающие кривые основного состояния [45].

Наряду с прямой задачей статистической механики жидкости — расчетом ее равновесных свойств по заданному потенциалу межчастичного взаимодействия  $\varphi(r)$ , также рассматривается и обратная задача, когда экспериментальные данные о структурном факторе  $S(q)$  привлекаются для отыскания

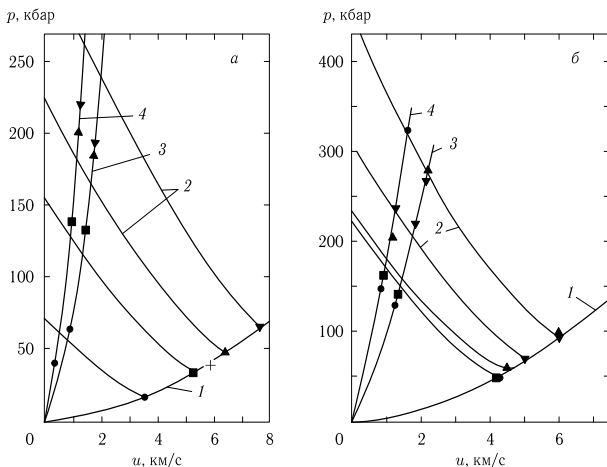


Рис. 2.12. Ударное сжатие жидких водорода (а) и дейтерия (б) [44]. 1, 2 — расчет по скорректированной модели жестких сфер [46] прямой и отраженных ударных волн, 3, 4 — ударные адиабаты магниевого и алюминиевого отражающих экранов, значки — эксперимент

адекватного потенциала [47]. Задача нахождения потенциала по данным дифракционных измерений для инертных газов и жидких металлов решается методами молекулярной динамики и интегральных уравнений, причем интегральное приближение дает лучшие результаты [47].

Как мы видели, метод интегральных уравнений привлекателен в связи с двумя обстоятельствами: возможность получить аналитические результаты, касающиеся структуры и термодинамических свойств простых жидкостей, и возможностью решить обратную задачу о восстановлении вида межмолекулярного потенциала  $U(r)$  по известной функции  $g(r)$ . Поиски такого уравнения ведутся с 1935 г., когда Борном, Кирквудом и Ивоном впервые был предложен упрощенный вариант интегральной связи функции пространственных корреляционных функций и  $g(r)$  и  $\varphi(r)$ . К настоящему времени известно несколько таких приближенных уравнений различной степени точности [1]. Для восстановления парного потенциала взаимодействия между частицами по известной парной корреляционной функции в методе интегральных уравнений служит формальной соотношение

$$g(r, T, n) = e^{-\varphi(r/T + \omega(r, T, n))}, \quad (2.12)$$

из которого вытекает, что

$$U(r) = -T[\ln g(r, T, n) - \omega(r, T, n)]. \quad (2.13)$$

Поэтому, если функция  $g(r)$  известна, и каким-нибудь способом удастся вычислить вторую функцию  $\omega$ , то можно найти парный потенциал.

В разреженной газообразной системе вероятность обнаружить две частицы на расстоянии  $r$  друг от друга пропорциональна фактору  $\exp(-U(r)/T)$ . В таком случае функция  $\omega = 0$ . Когда плотность частиц увеличивается и взаимодействие между ними становится существенным, функция  $\omega$  отличается от нуля. В гиперцепном (HNC) приближении, наиболее часто используемом по сравнению с другими приближениями, функция  $\omega$  представляется в виде  $\omega(r) = g(r) - 1 - c(r)$ , где  $c(r)$  — прямая корреляционная функция. Широко используется также и другое приближение — приближение Перкуса и Йевики, в котором  $\exp(\omega(r)) = g(r) - c(r)$ . В настоящее время получило распространение также приближение, предложенное Мартыновым и Саркисовым:  $\omega(r) = g(r) - 1 - c(r) + \alpha\omega^2$ , где  $\alpha$  — некоторая постоянная. Результаты, полученные на основе решения интегральных уравнений с такими приближениями, в ряде случаев хорошо согласуются с результатами

численного моделирования для твердых сфер леннард-джонсовых систем. В целом, в настоящее время не существует однозначного вывода в пользу одного из локальных приближений, и в литературе используются различные их виды [1, 47–51].

Анализ погрешностей показал, однако, что обратная задача нахождения  $\varphi(r)$  по  $g(r)$  является некорректной — для получения 10% процентной погрешности в  $\varphi(r)$  необходима погрешность исходной экспериментальной информации по  $S(q)$  не больше 1%. Для повышения точности при отыскании потенциала межчастичного взаимодействия помимо структурного фактора используется и дополнительная информация об уравнении состояния и равновесных свойствах жидкости. Характеристики потенциала можно найти и на основе только термодинамической информации, без использования данных дифракционных измерений. Учет экспериментов по ударному сжатию аргона и опытов по рассеянию молекулярных пучков позво-

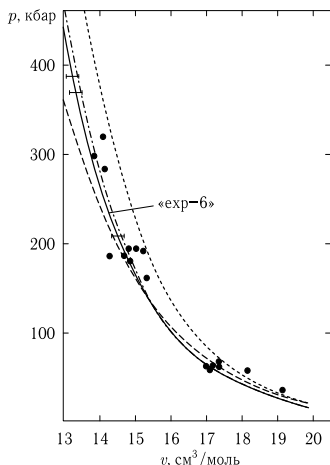


Рис. 2.13. Ударное сжатие жидкого аргона [35]. Значки — эксперимент, кривые — расчет ударной адиабаты с потенциалами различного типа (наилучшее описание дает потенциал «exp-6»)

лил [35], например, выбрать тип и определить параметры потенциала, наилучшим образом описывающего экспериментальные данные (рис. 2.13).

### 2.3. Пылевая плазма для теории жидкостей

В последнее время возникло новое интересное направление в статистической физике газов, жидкостей и твердых тел — использование экспериментов с пылевой плазмой для изучения равновесных и транспортных свойств ансамбля сильно взаимодействующих (коррелированных) частиц [11].

Пылевая плазма представляет собой частично ионизированный газ, который содержит отрицательно заряженные пылевые частицы макроскопических (5–100 мкм) размеров. В пылевой плазме микронные пылевые частицы приобретают значительный отрицательный заряд ( $q \approx 10^3 - 10^5 e$ ) и могут формировать квазистационарные плазменно-пылевые структуры, подобные жидкости или твердому телу [52–56].

Обладая целым рядом уникальных свойств [11] пылевая плазма является хорошей экспериментальной моделью как для изучения свойств сильно неидеальных систем, так и с точки зрения более глубокого понимания явлений самоорганизации веществ и процессов в природе. Экспериментальные исследования пылевой плазмы играют существенную роль в проверке существующих и развитии новых феноменологических моделей для сильно неидеальных жидкостных систем. Такие модели имеют большую значимость, поскольку, благодаря сильному межчастичному взаимодействию, в теории жидкости, как мы видели, отсутствует малый параметр, который можно было бы использовать для аналитического описания ее состояния структуры, и термодинамических характеристик, как это возможно в случае газов.

Уникальным свойством пылевой плазмы является то обстоятельство, что ее тяжелые частицы (пыль) рассеивают видимый свет и поэтому хорошо видны в оптическом диапазоне оптическими телекамерами или иногда глазом человека (рис. 2.14). Это позволяет, в отличие от классических рентгеновских или нейтронных методов определения бинарной корреляционной функции  $g_2(r)$ , прямым наблюдением (на «кинетическом» уровне) получать необходимые структурные, термодинамические и кинетические свойства системы любых порядков  $g_s(r_1, r_2, \dots, r_s)$ , температуру, давление, автокорреляционные функции УРС, коэффициенты переноса, диффузию и теплопроводность, и проверять таким образом основные постулаты статистической физики, например, уравнения БГКИ (2.2), гипотезы взаимности Кирквуда (2.3), соотношение Кубо, интегральные уравнения (2.4)–(2.8).

Начнем с классической задачи восстановления потенциала межчастичного взаимодействия по измеряемым структурным характеристикам плазменной жидкости [57]. Эксперименты проводились на установке высокочастотного емкостного разряда (рис. 2.15 [57]). В ходе эксперимента вакуумная камера заполнялась аргоном при давлении  $p = 20 - 30$  Па, на электроды подавалось

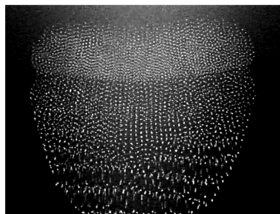


Рис. 2.14. Плазменный пылевой кристалл и плазменная жидкость

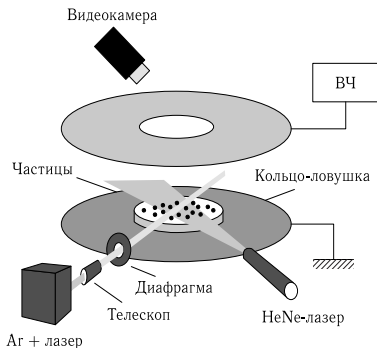


Рис. 2.15. Схема экспериментальной установки

напряжение от высокочастотного генератора с несущей частотой 13,56 МГц, между ними в атмосфере аргона возникал тлеющий разряд.

В разряд через отверстие в верхнем электроде из специального контейнера вбрасывались пылевые частицы, которые представляли собой либо пластиковые (МФ) прозрачные сферы диаметром 1,9 мкм, либо полидисперсные ( $Al_2O_3$ ), 5 мкм в диаметре. Частицы, попадая в разряд и заряжаясь отрицательно, зависали в приэлектродном слое. В результате наблюдению было доступно горизонтальное сечение пылевого образования. Регистрация положения пылевых частиц осуществлялась видеокамерой (см. рис. 2.15). Типичное изображение пылевых структур, полученных при проведении экспериментов, представлено на рис. 2.16.

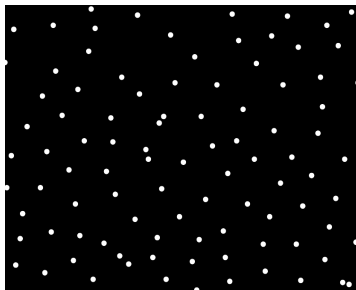


Рис. 2.16. Типичная пылевая структура, полученная в экспериментах

Видеозапись обрабатывалась при помощи специальной программы, которая позволяла идентифицировать положения отдельных частиц в поле зрения видеосистемы и построить бинарную и тройную корреляционные функции для каждой плазменно-пылевой структуры. Погрешность измерения корреляционных функций определяется выражением  $\delta_N = 1/\sqrt{N}$ , где  $N$  — число в ансамбле, по которому ведется усреднение. В наших экспериментах погрешность составляет менее 10%.

Задача восстановления потенциала по известной корреляционной функции  $g(r)$  решалась на основе интегральных уравнений теории жидкости (2.4)–(2.8) [1]. Основным соотношением, определяющим потенциал  $U(r)$ , является уравнение (2.13). Функция  $\omega$  в формуле (2.13) зависит от функции  $\gamma$ :

$$\gamma(r) = h(r) - c(r) + B(r). \quad (2.14)$$

В (2.14) стоит разность прямой корреляционной функции  $c(r)$  и функции  $h(r) = g(r) - 1$ ,  $B(r)$  — бридж-функционал, представляющий бесконечные ряды неприводимых диаграмм [58, 59]. Просуммировать бесконечные ряды для бридж-функционала невозможно, и задачей теории является поиск адекватных и физически обоснованных аппроксимаций бридж-функционала. Переход к приближенным уравнениям основан на замене нелокального бридж-функционала  $B(r)$  локальной бридж-функцией  $B(h(r))$  или  $B(\gamma(r))$ ,  $B(\omega(r))$ . Строгого теоретического обоснования возможности такой замены не существует.

Для расчетов параметров потенциала были выбраны две измеренные корреляционные функции, представленные на рис. 2.17 и 2.18. Как видно, эти корреляционные функции имеют выраженный первый максимум и в дальнейшем осциллируют около теоретического значения,  $g(r) \rightarrow 1$ .

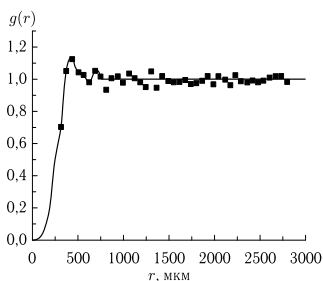


Рис. 2.17. Корреляционная функция при  $n = 200 \text{ см}^{-3}$ . Точки соответствуют измерениям работы [57]. Сплошная линия — корреляционная функция, используемая в расчетах

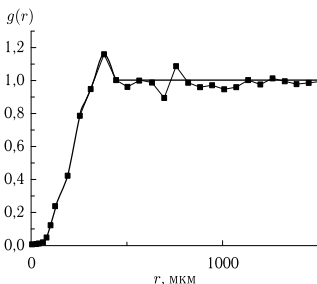


Рис. 2.18. Корреляционная функция при  $n = 3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ . Точки соответствуют измерениям работы [57]. Сплошная линия — корреляционная функция, используемая в расчетах

В работе [57] потенциальная энергия, найденная по измеренным корреляционным функциям, аппроксимировалась выражением для экранированного кулоновского потенциала с произвольным зарядом и радиусом экранирования  $R$ :

$$\varphi(Z, R) = \frac{(Ze)^2}{r} e^{-r/R}.$$

Параметры  $Z$  и  $R$  находятся из условия наилучшего соответствия потенциалов  $U$  и  $\varphi$ . Потенциал  $U$  рассчитывался по формулам (2.4)–(2.7), (2.13), (2.14).

Для корреляционной функции на рис. 2.17 плотность пылевых частиц мала и реализуется газовый случай, когда потенциал  $U(r) = -T \ln g(r)$ . Символы на рис. 2.19 соответствуют найденной таким образом зависимости. Сплошная линия на рис. 2.19, построенная этим способом, приводит к значениям  $Z = 490$  и  $R = 87$  мкм. Отметим, что найденное значение радиуса экранирования близко к значению  $R \approx 100$  электронного дебаевского радиуса, оцененного по параметрам разряда при  $n_e \approx 10^9$  см<sup>-3</sup>,  $T_d \approx 0,3$  эВ. Параметр кулоновской неидеальности, оцененный по среднему межчастичному расстоянию и найденному значению заряда  $\Gamma = (Ze)^2 n^{1/3} / T \approx 2$ . Однако в данных условиях среднее межчастичное расстояние  $r \approx 1700$  мкм заметно превосходит найденный выше дебаевский радиус, поэтому взаимодействие пылевых частиц на средних расстояниях сильно ослаблено экранировкой. Для второй корреляционной функции (рис. 2.18) плотностная поправка к потенциалу существенна. Поэтому расчет проводился с использованием различных замыканий. На рис. 2.19 представлены результаты расчета.

Линии с символами на рис. 2.20 соответствуют приближениям [57]: 1 —  $U(r) = -T \ln g(r)$ , 2 — PY, 3 — CHNC, 4 — MS. Сплошная линия без символов отвечает экранированному потенциалу (2.15) с  $R = 500$  мкм и  $Z = 1320$ . Как

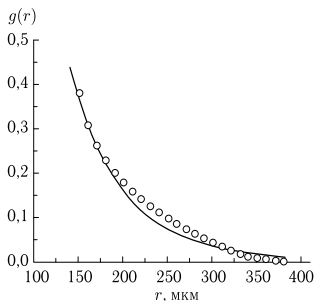


Рис. 2.19. Кружки соответствуют зависимости  $U(r) = -T \ln g(r)$ , сплошная линия — экранированному потенциалу с  $Z = 490$  и  $R = 87$  мкм

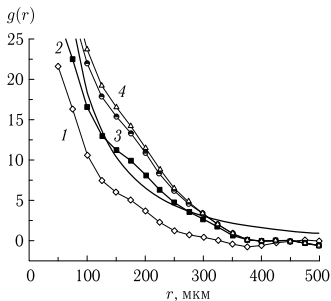


Рис. 2.20. Линии с символами: 1 —  $U(r) = -T \ln g(r)$ , 2 — PY, 3 — CHNC, 4 — MS. Сплошная линия без символов — экранированный потенциал с  $Z = 1320$  и  $R = 500$  мкм

видно, она наиболее идет наиболее близко к приближению РУ. Параметр кулоновской неидеальности для этих условий равен примерно 2,6, а найденный радиус экранирования соответствует следующим параметрам плазмы:  $n_e \approx 10^9 \text{ см}^{-3}$  и  $T_d \approx 1 \text{ эВ}$ . Среднее расстояние между пылевыми частицами  $r \approx 200 \text{ мкм}$  и по порядку величины близко к дебаевскому радиусу.

Допуская, что подсистема пылевых частиц находится в локальном термодинамическом равновесии при температуре  $T_d$ , по измеренным корреляционным функциям и найденному потенциалу можно найти некоторые термодинамические параметры такой системы пылевых частиц. Прежде всего, это парциальное давление пылевой компоненты. Используя известную формулу [60], получаем, что давление равно

$$p = nT - \frac{4\pi n^2}{6} \int_0^{\infty} r^3 \frac{d\varphi}{dr} g(r) dr. \quad (2.15)$$

Приведенная изотермическая сжимаемость имеет вид

$$\chi = T \left( \frac{\partial n}{\partial p} \right)_{\gamma} = 1 + 4\pi n \int_0^{\infty} h(r) r^2 dr. \quad (2.16)$$

Полная энергия пылевой частицы равна

$$E = 3T/2 + 2\pi n \int_0^{\infty} r^2 \varphi(r) g(r, T) dr. \quad (2.17)$$

Как известно, отношение потенциальной энергии к кинетической является параметром неидеальности системы  $\Gamma$ . Из (2.17) вытекает определение этого параметра через корреляционную функцию:

$$\Gamma_1 = \frac{4\pi n}{3T} \int_0^{\infty} \varphi(r) g(r) r^2 dr. \quad (2.18)$$

Значения рассчитанных термодинамических параметров  $p/nT$ ,  $\Gamma_1$  и  $\chi$  для пылевой подсистемы приведены в таблице 2.1. Для идеального газа изотермическая сжимаемость  $\chi = 1$ . Чем меньше значение  $\chi$  по сравнению с единицей, тем сильнее отклонение рассматриваемого состояния от состояния идеального газа. Как и следовало ожидать, с термодинамической точки зрения состояние пылевой системы с корреляционной функцией (рис. 2.17) весьма близко к состоянию идеального газа.

Для второй корреляционной функции (рис. 2.18) ситуация иная. Как видно из таблицы 2.1, приведенная изотермическая сжимаемость  $\chi < 1$ , а фактор сжимаемости  $p/nT > 1$ . На основании этих значений можно сделать некоторое заключение о термодинамическом состоянии плазменной жидкости. Применим к системе пылевых частиц некоторые выводы, полученные для твердых заряженных сфер с эффективным радиусом  $d$ , зарядом  $Z$ . Как

Таблица 2.1. Рассчитанные термодинамические параметры для пылевой подсистемы [57]

N, п/п	$n$ , см <sup>3</sup>	$p$ , Па	$R_d$ , мкм	$T_d$ , эВ	$R$ , мкм	$Z$	$\Gamma$	$p/nT$	$\Gamma_1$	$\chi$
1	200	$\approx 25\text{--}30$	1,5–5	$\approx 0,1$	87	490	2	1	0,03	1
2	$3 \cdot 10^4$	20	$\approx 20$	$\approx 5$	500	1320	2,5	8,5	4,6	0,2

показано в работе [61] критическая температура и давление в такой системе могут быть оценены следующим образом:

$$T_c \approx 0,05D; \quad P_c \approx 0,01T_c/d \quad (2.19)$$

где  $D = Ze^2/d$ . Очевидно, что критические параметры, оцененные для пылевой плазменной жидкости, имеют достаточно низкие значения. Поэтому большинство измеренных параметров пылевой плазмы находятся в закритической области ( $T > T_c$ ,  $p > p_c$ ). Об этом же косвенно свидетельствует значение фактора сжимаемости  $\chi > 1$ . Для многих веществ (инертные газы, углеводороды, вода и др.) линия единичного фактора  $p/nT = 1$ , построенная в координатах плотность-температура, является прямой, проходящей в закритической области [62, 63]. Области состояний, лежащей под этой линией, соответствуют значения  $p/nT < 1$  (в частности, область двухфазных состояний целиком лежит под этой линией). Область, где  $p/nT > 1$ , всегда находится выше линий фазового равновесия и соответствует состояниям заряженного флюида. С этой точки зрения можно заключить, что пылевая плазма для второй корреляционной функции (рис. 2.18) также, по-видимому, соответствует закритическому состоянию.

В заключение этого раздела следует отметить, что впервые с помощью интегральных уравнений теории жидкости из экспериментально измеренных парных корреляционных функций найдены заряд, радиус экранирования и потенциал взаимодействия пылевых частиц в газовой и коррелированной жидкостной структуре. По этим данным оценены фактор сжимаемости, приведенная изотермическая сжимаемость и внутренняя энергия системы. Анализ найденных параметров позволяет сделать вывод, что одному из режимов состояния пылевой системы соответствует идеальный газ, а другому — закритический флюид.

Используя данную технику прямых визуальных наблюдений за структурой пылевой плазмы, рассмотрим вопрос о применимости процедуры замыкания (2.3) цепочки интегро-дифференциальных уравнений теории жидкости ББГКИ (2.2). Начнем с процедуры замыкания (2.3) уравнений (2.2).

Как мы уже отмечали, ставшие к настоящему времени классическими рентгеновские и нейтронные методы экспериментального изучения структурных свойств жидкостей позволяют получить информацию только о бинарной корреляционной функции распределения  $g_2(r)$  и не применимы для изучения  $g_3(r)$  и корреляционных функций более высокого порядка  $g_s(r_n, \dots, r_s)$ . Для анализа трехчастичной корреляции в реальных жидкостях обычно используют непрямые методы диагностики, например, измерения структурного фактора  $S(q)$ , для нескольких значений давления среды при ее постоянной темпе-

ратуре, откуда восстанавливают производную  $\partial g(r)/\partial \rho$ , которая, в свою очередь, содержит информацию о трехчастичной функции  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  [47, 64]. Извлечение такой информации требует дополнительных данных об изотермической сжимаемости исследуемой среды. Этого недостатка лишены опыты с пылевой плазмой [65, 66], дающие возможность видеть реальную структуру объекта (рис. 2.16), открывая возможность полного структурного изучения жидкого состояния.

Далее речь пойдет о трехчастичной функции распределения  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ , которая не только необходима для проверки условия замыкания Кирквуда (2.3), но и является важной при расчете таких физических характеристик среды, которые зависят от производных парной функции  $g(r)$  по температуре  $\partial g(r)/\partial T$  или плотности частиц  $\partial g(r)/\partial \rho$ , таких как энтропия, коэффициенты теплового расширения и т.д. Функция  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  определяет вероятность одновременного обнаружения трех частиц вблизи точек  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ . В отличие от бинарной, функция  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  зависит от трех пространственных координат, а, соответственно, позволяет получить дополнительную информацию об исследуемой структуре, в частности, об ориентационном порядке в исследуемой системе частиц.

Для аппроксимации трехчастичной корреляционной функции часто используют суперпозиционное приближение Кирквуда:

$$g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) - g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot g(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \cdot g(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1). \quad (2.20)$$

Данная аппроксимация опирается на пренебрежение в гамильтониане системы членами вида  $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)$ , которые не сводятся к парным взаимодействиям. Соотношение (2.20) часто используется при расчете интегральных уравнений и кинетики взаимодействующих частиц, а также при восстановлении потенциалов межчастичного взаимодействия, методами, основанными на применении гиперцепного приближения или уравнения Перкуса-Йевики [47, 67–70]. Тем не менее, существующие численные исследования, выполненные для случая взаимодействия твердых сфер и для частиц, взаимодействующих с потенциалами типа Леннарда-Джонсона, показывают неудовлетворительность суперпозиционного приближения даже в случае малых плотностей частиц [68–70]. С ростом неидеальности исследуемых жидкостных систем, отличие аппроксимации  $g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  (2.20) от точного значения  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  может достигать порядка 100%.

Для анализа использовались данные эксперимента (рис. 2.15), позволяющие определить положение и смещения макрочастиц в наблюдаемых структурах. Во всех анализируемых случаях структуры являлись квазистационарными системами жидкостного типа. Среднее межчастичное расстояние  $r_p$  в анализируемых пылевых структурах изменялось от 260 до 350 мкм. В результате обработки видеозаписей типа (рис. 2.21) были получены парные  $g(r)$  и трехчастичные корреляционные функции  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ , усредненные в течение 2–2,5 с при неизменных экспериментальных условиях. Парные корреляционные функции  $g(r/r_p)$  приведены на рис. 2.22 для различных давлений  $p$  газа и мощности разряда  $W$ . Сечение полученных трехчастичных корреляционных функций  $g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  ( $\mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ ) при фиксированной величине  $r_{12}$ , равной наиболее вероятному межчастичному расстоянию  $r_p^{\text{max}}(r_{12} = r_p^{\text{max}})$ ,

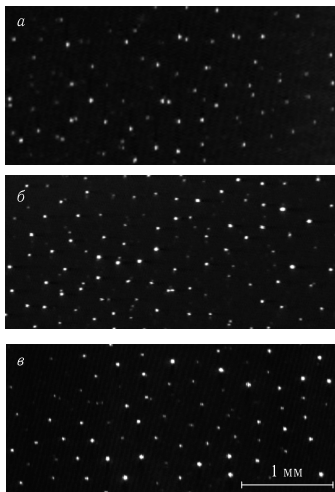


Рис. 2.21. Видеоизображения частиц пылевого облака в приэлектродном слое разряда для различных экспериментов: *а* —  $p = 5$  Па,  $W = 9$  Вт; *б* —  $p = 3$  Па,  $W = 2$  Вт; *в* —  $p = 7$  Па,  $W = 10$  Вт

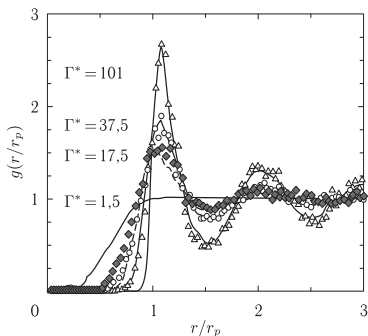


Рис. 2.22. Парные корреляционные функции  $g(r/r_p)$ , измеренные в экспериментах: (●) —  $p = 5$  Па,  $W = 9$  Вт; (○) —  $p = 3$  Па,  $W = 2$  Вт; (△) —  $p = 7$  Па,  $W = 10$  Вт и полученные в результате численного моделирования для разных  $\Gamma^*$  (сплошные линии), указанных на рисунке

определяемому по положению максимума парной корреляционной функции  $g(r)$  для тех же параметров разряда, приведены на рис. 2.23. Там же показаны результаты расчета трехчастичной функции  $g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  в рамках суперпозиционного приближения (2.20). Для представления данных функций

$g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$ ,  $g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  в наглядном «двумерном» виде удобным для анализа они были нормированы на величину максимума  $g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$ : единице соответствует черный цвет, белый цвет —  $g_3 = g_3^{\text{сн}} = 0$ . Отклонение функции  $g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  от результатов вычисления  $g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  указано в подписи к рис. 2.23 и было рассчитано, исходя из относительной среднеквадратичной ошибки суперпозиционного приближения:

$$\delta = \left[ \frac{\sum_{i=1}^N \{g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{2i}, \mathbf{r}_{i1}) - g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{2i}, \mathbf{r}_{i1})/g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{2i}, \mathbf{r}_{i1})\}^2}{N} \right]^{1/2},$$

где  $N$  — полное число элементов пространства  $d\mathbf{r}_i$  вблизи окрестности точки с координатой  $\mathbf{r}_i$ , на которые разбивался анализируемый слой плазменной жидкости. Таким образом, ошибка  $\delta$  в условиях эксперимента варьировалась для сильнокоррелированных структур в пределах 15–20%, а с ростом неидеальности — примерно от 30% до 60%.

Визуальное сравнение полученных результатов показывает, что в регистрируемых структурах наблюдается формирование ближнего ориентационного порядка макрочастиц, которое отражается в появлении максимумов  $g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  в узлах гексагональных кластеров, показанных на рис. 2.23 *а, б* штриховыми линиями. По мере роста максимума парной корреляционной функции (см. рис. 2.22) величина этих максимумов, расположенных на расстояниях  $r$  близких к  $r_p^{\text{max}}$  растет, а также появляются новые максимумы на расстояниях  $r \approx 2r_p^{\text{max}}$ . Данное явление не проявляется при анализе суперпозиционного приближения  $g_3^{\text{сн}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$ .

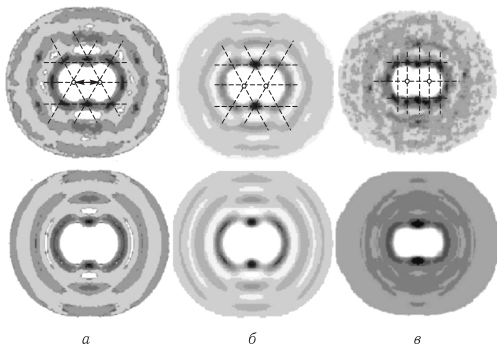


Рис. 2.23. Сечения измеренных трехчастичных функций  $g_3$  (верхний ряд) и рассчитанных в суперпозиционном приближении  $g_3^{\text{сн}}$  (нижний ряд) для различных экспериментов: *а*) —  $p = 7$  Па,  $W = 10$  Вт,  $\delta = 0,61$ ; *б*) —  $p = 3$  Па,  $W = 2$  Вт,  $\delta = 0,28$ ; *в*) —  $p = 5$  Па,  $W = 9$  Вт,  $\delta = 0,3$

Для сравнения полученных экспериментальным путем результатов с корреляцией макрочастиц в системах было выполнено численное моделирование. Расчеты проводились для трехмерной системы методом молекулярной динамики Ланжевена при периодических граничных условиях [65]. Данный метод основан на решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений с силой Ланжевена  $F_{Br}$ , которая учитывает случайные толчки окружающих молекул газа или другие случайные процессы, приводящие к установлению равновесной (стационарной) кинетической температуры  $T_p$  частиц, характеризующей кинетическую энергию их стохастического (теплового) движения. При этом наряду со случайными силами  $F_{Br}$  учитывались силы парного межчастичного взаимодействия  $F_{int}(l) = -eZ_p \frac{d\varphi}{dl}$ :

$$m_p \frac{d^2 \mathbf{l}_k}{dt^2} = \sum_j F_{int}(l)|_{l=|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} \frac{\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j}{|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} - m_p \nu_{fr} \frac{d\mathbf{l}_k}{dt} + \mathbf{F}_{Br}, \quad (2.21)$$

где  $l = |\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|$  — межчастичное расстояние,  $m_p$  — масса частицы,  $\nu_{fr}$  — коэффициент трения макрочастиц, который для рассматриваемых условий может быть получен в рамках свободномолекулярного приближения [71].

Полученные парные корреляционные функции представлены на рис. 2.22 для различных параметров неидеальности  $\Gamma^*$ . Легко видеть, что экспериментальные результаты хорошо соответствуют системам с параметрами неидеальности  $\Gamma^* \approx 100$ , 37,5 и 17,5. В последнем случае ( $\Gamma^* \approx 17,5$ ) различия между расчетом и изменениями  $g(r)$  наиболее заметны, поскольку экспериментальная кривая имеет более широкий первый максимум, связанный с малой неоднородностью анализируемой пылевой структуры. Функция  $g(r)$  для  $\Gamma^* \approx 2,5$ , показанная на том же рисунке, соответствует случаю, когда поведение парной корреляционной функции приобретает монотонный характер, т. е. исчезают максимумы  $g(r)$ . Сечения трехчастичных корреляционных функций и их суперпозиционных приближений даны на рис. 2.23, 2.24 для различных ( $\Gamma^*$ ) при  $r_{12} = r_p^{\max}$ . Среднеквадратная ошибка  $\delta$  для суперпозиционного приближения указана в подписи к рис. 2.24 и для представленных численных данных выше значений  $\delta$ , зарегистрированных в лабораторных экспериментах (см. рис. 2.23).

С ростом величины  $\Gamma^* > 40-50$  вид трехчастичной корреляционной функции для численного эксперимента начинает зависеть от ориентации моделируемой плоскости. Последнее обстоятельство может быть связано с тем, что с ростом параметра неидеальности  $\Gamma^* > 40-50$  динамика моделируемой жидкостной системы приобретает аналогию с твердым телом и может рассматриваться в рамках «теории» скачков, разработанной для описания сильно коррелированных молекулярных жидкостей [47]. Суть данной теории состоит в том, что молекулы такой жидкости находятся в равновесном («оседлом») состоянии в течении времени, необходимого для сообщения им энергии (энергии активации), достаточной для разрыва потенциальных связей с соседними молекулами и перехода в окружение других молекул.

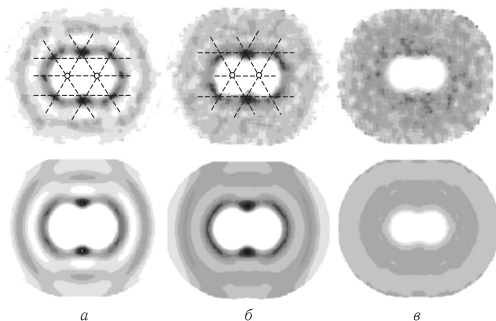


Рис. 2.24. Сечения измеренных трехчастичных функций  $g_3$  (верхний ряд) и рассчитанных в суперпозиционном приближении  $g_3^{\text{сп}}$  (нижний ряд) для различных параметров  $\Gamma^*$ : а) —  $\Gamma^* = 37,5$ ,  $\delta = 0,61$ ; б) —  $\Gamma^* = 17,5$ ,  $\delta = 0,28$ ; в) —  $\Gamma^* = 1,5$ ,  $\delta = 0,3$

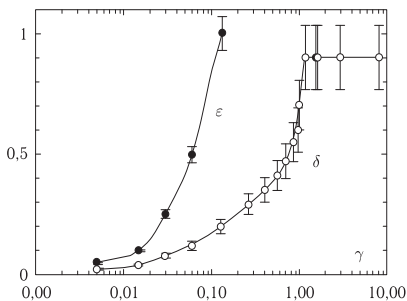


Рис. 2.25. Относительная среднеквадратичная погрешность  $\delta$  (○) суперпозиционного приближения и относительные погрешности  $\varepsilon$  (●) уравнения Перкуса-Йевики в зависимости от параметра  $\gamma$

На рис. 2.25 приведена зависимость погрешности суперпозиционного приближения во всей области жидкого состояния вплоть до кристаллизации системы.

С ростом  $\Gamma^*$  до 100 среднеквадратичная ошибка  $\delta$  суперпозиционного приближения для анализируемого сечения трехчастичной функции несколько увеличивается и составляет около 70%. При  $\Gamma^* \rightarrow 100$  в моделируемой системе формируется объемно центрированная кристаллическая решетка. Иллюстрация сечения такой решетки (по грани элементарной кубической ячейки), а также функций  $g_3(\mathbf{r}_p^{\text{max}}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  и  $g_3^{\text{сп}}(\mathbf{r}_p^{\text{max}}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  для  $\Gamma^* \approx 400$  показаны на рис. 2.26. Для сравнения на том же рисунке приведены результаты для гек-

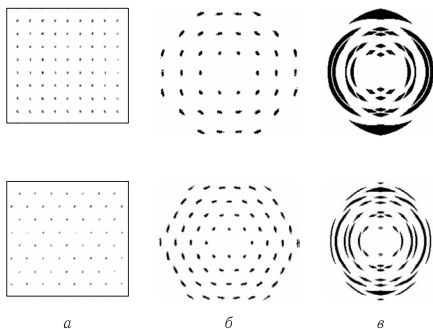


Рис. 2.26. Сечения кристаллической кубической решетки (а) и рассчитанные для этих плоскостей трехчастичные корреляционные функции  $g_3$  (б) и для суперпозиционного приближения  $g_3^{сп}$  (в). Верхний ряд — сечение объемно-центрированной решетки, нижний ряд — сечение гранецентрированной решетки ( $\delta = 0,36$ ), соответствующее гексагональному расположению частиц ( $\delta = 0,79$ )

сагональной структуры частиц. Ошибка суперпозиционного приближения  $\delta$  указана в подписи к рисунку.

Анализ экспериментальных результатов показал, что отличие расчетов в суперпозиционном приближении [66] от измерений трехчастичной корреляционной функции составляет примерно 30–60% для анализируемых сечений  $g_3(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{31})$  при  $r_{12} = r_p^{\max}$ . Наблюдалось формирование регулярных кластеров макрочастиц как в экспериментальных системах, так и в моделируемых жидкостных структурах. Численные расчеты трехчастичной корреляции макрочастиц, взаимодействующих с экранированным потенциалом, показали, что формирование таких кластеров в моделируемых системах наблюдается с ростом эффективного параметра неидеальности  $\Gamma^*$ , что хорошо согласуется с результатами моделирования, представленными в работе [72].

Таблица 2.2. Радиус частицы ( $a_p$ ), температура ( $T$ ), среднее межчастичное расстояние ( $r_p$ ) и параметр  $\gamma$  для различных серий измерений в вч разряде при мощности  $W$  и давлении  $p$

N	$W$ , Вт	$p$ , Па	$a_p$ , мкм	$T$ , эВ	$r_p$ , мкм	$\gamma = \Gamma/\Gamma_c$
1	10	$\approx 7$	1,7	$\approx 0,29$	295	0,96
2	10	$\approx 3$	1,7	$\approx 0,57$	315	0,4
3	3	$\approx 2$	1,7	$\approx 0,61$	270	0,13
4	5	$\approx 5$	0,95	$\approx 0,09$	275	0,06

Проведем теперь сопоставление экспериментальных и рассчитанных методом молекулярной динамики и интегральных уравнений бинарных корреляционных функций для оценки применимости метода интегральных уравнений для описания газов и жидкостей. Использовалась постановка опытов

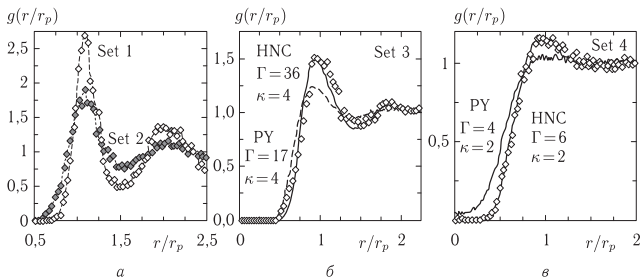


Рис. 2.27. Бинарные корреляционные функции  $g(\mathbf{r}/r_p)$ , полученные в различных сериях измерений (символы), а также корреляционные функции (см. (б) и (в)), полученные при численном моделировании для различных значений  $\Gamma$  и  $\kappa$  для парных потенциалов, восстановленных методами приближения Перкуса–Йевики (серые линии) и гиперцепного уравнения (черные линии)

(таблица 2.2, рис. 2.15). Соответствующие корреляционные функции газовых и жидкостных структур можно видеть на рис. 2.27, где они сопоставляются с машинными расчетами и данными интегральных уравнений.

Видно, что интегральные уравнения разумно описывают поведение плазменной жидкости практически во всем диапазоне жидкостного состояния. При этом гиперцепное приближение более подходит для описания состояний плазменной жидкости, так как лучше других учитывает дальние корреляции. Модель же Перкуса–Йевики, по-видимому, имеет определенные преимущества в описании ближнего порядка.

### Список литературы

1. March N. H., Tosi M. P. Introduction to liquid state physics. — New Jersey, London, Singapore, Hong Kong: World Scientific, 2002.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т.5,9. Статистическая физика. В 2-х ч. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
3. Barker J. A., Henderson D. What is «liquid»? Understanding the states of matter // Rev. Mod. Phys. — 1976. — V. 48, No. 4. — P. 587.
4. Майер Дж., Генперт-Майер М. Статистическая механика. — М.: Мир, 1980.
5. Мейсон Э., Сперлинг Т. Вириальные уравнения состояния. — М.: Мир, 1972.
6. Физика простых жидкостей / Под ред. Г. Темперли, Д. Роулинсона, Д. Рашбрука. — М.: Мир, 1971.
7. Eyring H., Jhon M. S. // Significant Liquid Structures. — N.Y.: J. Wiley, 1969. — Ch. 2, 3.
8. Steffen B., Hosemann R. Paracrystalline microdomains in monatomic liquids. II. Three-dimensional structure of microdomains in liquid lead // Phys. Rev. B. — 1976. — V. 13, No. 8. — P. 3232.
9. Cowley E. R., Barker J. A. A self-consistent cell model for the melting transition in hard sphere systems // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 73, No. 7. — P. 3452.
10. Andersen H. C., Chandler D. // Adv. Chem. Phys. — V. 34. — P. 109. 1976.

11. Пылевая плазма (эксперимент и теория) / Ваулина О. С., Петров О. Ф., Форттов В. Е. и др. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
12. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space / Ed. by V. E. Fortov, G. E. Morfill. — CRC Press, 2009.
13. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. — М.: Наука, 1961.
14. Barker J. A., Henderson D. What is "liquid"? Understanding the states of matter // Rev. Mod. Phys. — 1976. — V. 48, No. 4. — P. 587.
15. Mansoori G. A., Canfield F. B. Variational Approach to the Equilibrium Thermodynamic Properties of Simple Liquids. I // J. Chem. Phys. — 1969. — V. 51, No. 11. — P. 4958.
16. Bernal J. D. // Nature. — 1960. — V. 188. — P. 910.
17. Bernal J. D. // Proc. R. Soc. London. — 1964. — V. A280. — P. 299.
18. Scott G. D. // Nature. — 1960. — V. 188. — P. 908.
19. Tabor D. Gases, Liquids and Solids. — Cambridge: University Press, 1993.
20. Ree F. H. Physical Chemistry — An Advanced Treatise: Liquid State / Ed. by H. Eyring, D. Henderson, W. Yost. — N.Y.: Academic Press, 1971. — V. 8A.
21. Alder B. J., Wainwright T. E. // J. Chem. Phys. — 1957. — V. 27. — P. 1208.
22. Корнер С. Б. Оптические исследования свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков // УФН. — 1968. — Т. 94, № 4. — С. 641.
23. Hansen J. P., McDonald I. R. Theory of Simple Liquids. — N.Y.: Academic Press, 1976.
24. Hoover W. G., Ross M. // Contemp. Phys. — 1971. — V. 12. — P. 339.
25. Generalized van der Waals equation of state / Hoover W. G., Stell G., Goldmark E., Degani G. D. // J. Chem. Phys. — 1975. — V. 63, No. 12. — P. 5434.
26. Young D. A., Alder B. J. Studies in molecular dynamics. XVII. Phase diagrams for «step» potentials in two and three dimensions // J. Chem. Phys. — 1979. — V. 70, No. 1. — P. 473–481.
27. Young D. A., Alder B. J. Studies in molecular dynamics. XVIII. The square-well phase diagram // J. Chem. Phys. — 1979. — V. 73, No. 5. — P. 2430.
28. Young D. A., Alder B. J. Critical Point of Metals from the van der Waals Model // Phys. Rev. A. — 1971. — V. 3, No. 1. — P. 364.
29. Gathers G. R., Shaner J. W., Young D. A. Experimental, Very High-Temperature, Liquid-Uranium Equation of State // Phys. Rev. Lett. — 1974. — V. 33, No. 2. — P. 70.
30. Young D. A. Report UCRL-52352. — Livermore: Univ. of California, 1977.
31. Gathers G. R., Shaner J. W., Hixson R. S., Young D. A. // High Temp. High Press. — 1979. — V. 11. — P. 653.
32. Ashcroft N. W., Stroud D. // Sol. State Phys. — 1978. — V. 3. — P. 1.
33. Ross M. Extension of liquid-metal theory to dense partially ionized plasmas // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 8. — P. 3140.
34. Ross M., McMahan A. K. Condensed xenon at high pressure // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1658.
35. Ross M. The repulsive forces in dense argon // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 73, No. 9. — P. 4445.
36. Young D. A., Ross M. Theoretical calculation of thermodynamic properties and melting curves for hydrogen and deuterium // J. Chem. Phys. — 1981. — V. 74, No. 12. — P. 6950.
37. Young D. A., McMahan A. K., Ross M. Equation of state and melting curve of helium to very high pressure // Phys. Rev. B. — 1981. — V. 24, No. 9. — P. 5119.

38. Ross M., DeWitt H. E., Hubbard W. B. Monte Carlo and perturbation-theory calculations for liquid metals // Phys. Rev. A. — 1981. — V. 24, No. 2. — P. 1016.
39. Mon K. K., Gann R., Stroud D. Thermodynamics of liquid metals: The hard-sphere versus one-component-plasma reference systems // Phys. Rev. A. — 1981. — V. 24, No. 4. — P. 2145.
40. Kerley G. I. Perturbation theory and the thermodynamic properties of fluids. I. General theory // J. Chem. Phys. — 1980. — No. 73. — P. 469.
41. Kerley G. I. Perturbation theory and the thermodynamic properties of fluids. II. The CRIS model // J. Chem. Phys. — 1980. — No. 73. — P. 478.
42. Kerley G. I. Perturbation theory and the thermodynamic properties of fluids. III. Inverse-power and 6-12 potentials // J. Chem. Phys. — 1980. — No. 73. — P. 487.
43. Kerley G. I., Abdallah J. Theoretical equations of state for molecular fluids: nitrogen, oxygen, and carbon monoxide // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 73, No. 10. — P. 5337.
44. Dick R. D., Kerley G. I. Shock compression data for liquids. II. Condensed hydrogen and deuterium // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 73. — P. 5264.
45. Стишов С. М., Макаренко И. Н., Николаенко А. М. // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 32. — С. 40.
46. Ващенко В. Я., Зубарев В. Н. // ФТТ. — 1963. — Т. 5. — С. 886.
47. Ailawadi N. K. Equilibrium theories of simple liquids // Phys. Rep. — 1980. — V. 57, No. 4. — P. 241.
48. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. — Ленинград: Наука, 1975.
49. Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy / Ed. by H. Z. Cummins, E. R. Pike. — New York: Plenum, 1974.
50. Мартынов Г. А., Саркисов Г. Р. // ДАН СССР. — 1981. — Т. 260. — С. 1348.
51. Саркисов Г. Р. Приближенные уравнения теории жидкостей в статистической термодинамике классических жидких систем // УФН. — 1999. — Т. 169, № 6. — С. 625.
52. Chu J. H., I L. Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas // Phys. Rev. Lett. — 1994. — V. 72, No. 25. — P. 4009.
53. Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma / Thomas H., Morfill G. E., Demmel V. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — V. 73, No. 5. — P. 652.
54. Melzer A., Trottenberg T., Piel A. Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices // Phys. Lett. A. — 1994. — V. 191, No. 3-4. — P. 301.
55. Кристаллизация пылевой плазмы в положительном столбе тлеющего разряда / Фортвов В., Нефедов А., Торчинский В. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 1996. — Т. 64, № 2. — С. 86.
56. Упорядоченные структуры в неидеальной пылевой плазме тлеющего разряда / Липаев А., Молотков В., Нефедов А. и др. // ЖЭТФ. — 1997. — Т. 112, № 6. — С. 2030.
57. Investigation of the interaction potential and thermodynamic functions of dusty plasma by measured correlation functions / Fortov V. E., Gavrikov A. V., Petrov O. F. et al. — 2007. — V. 14, No. 4. — P. 040705.
58. Martynov G. A., Sarkisov G. R. // Dokl. Akad. Nauk SSSR. — 1981. — V. 260. — P. 1348.
59. Мартынов Г. А. Проблемы фазовых переходов в статистической механике // УФН. — 1999. — Т. 169, № 6. — С. 595.
60. Скрышевский А. Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. — М.: Высшая школа, 1980.

61. *Ликальтер А. А.* Критические точки конденсации в кулоновских системах // УФН. — 2000. — Т. 170, № 8. — С. 831.
62. *Martynov G. A.* Fundamental Theory of Liquid. — Bristol, Philadelphia, N.Y.: Adam Hilger, 1992.
63. *Apfelbaum E. M., Vorob'ev V. S., Martynov G. A.* Virial expansion providing of the linearity for a unit compressibility factor // J. Phys. Chem. A. — 2004. — V. 108, No. 47. — P. 10381.
64. *Raveché H. J., Mountain R. D.* Three Atom Correlations in Liquid Neon // J. Chem. Phys. — 1972. — V. 57, No. 9. — P. 3987.
65. Three-Particle Correlations in Nonideal Dusty Plasma / *Vaulina O. S., Petrov O. F., Fortov V. E. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 93, No. 3. — P. 035004.
66. *Fortov V. E., Petrov O. F., Vaulina O. S.* Dusty-Plasma Liquid in the Statistical Theory of the Liquid State // Phys. Rev. Lett. — 2008. — V. 101. — P. 195003.
67. *Balescu R.* Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. — N.Y.: Wiley, 1975.
68. *Raveché H. J., Mountain R. D.* Three Atom Correlations in Liquid Neon // J. Chem. Phys. — 1972. — V. 57, No. 9. — P. 3987.
69. *Raveché H. J., Mountain R. D., Streett W. B.* Three Atom Correlations in the Lennard-Jones Fluid // J. Chem. Phys. — 1972. — V. 57, No. 11. — P. 4999.
70. *Shion Wang S., Krumhansl J. A.* Superposition Assumption. II. High Density Fluid Argon // J. Chem. Phys. — 1972. — V. 56, No. 9. — P. 4287.
71. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.
72. Criteria of Phase Transitions in a Complex Plasma / *Vaulina O. S., Vladimirov S. V., Petrov O. F., Fortov V. E.* // Phys. Rev. Lett. — 2002. — V. 88. — P. 245002.

## КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

### 3.1. Приближения Хартри и Хартри–Фока

При понижении температуры жидкости происходит ее переход к твердому телу, характеризующемуся трансляционной симметрией тяжелых частиц (ионов, атомов, молекул). И хотя твердое состояние занимает на фазовой диаграмме вещества (рис. 2.1, 2.2) не столь обширную область, роль этой фазы в нашей жизни огромна. Оно составляет основу многочисленных технических (материалы), биологических, геофизических и медицинских и других приложений.

В настоящее время здесь накоплен громадный экспериментальный материал по теплофизическим свойствам твердых тел и созданы изощренные методы их расчета (см. главу 5 и содержащиеся там ссылки). Подчеркнем, что при умеренных (менее 5–50 кбар) давлениях важную роль играют прочностные свойства материалов, которые при приложении давления сопротивляются не только изменению объема (термодинамика), но (в отличие от газов и жидкостей) и изменению формы, а сами силы и деформации носят тензорный характер. Поведение твердого тела в этих условиях описывается разнообразными моделями прочности, которым посвящена обширная литература [1–4]. Выше предела прочности  $\sigma_{\text{пр}}$  сдвиговыми напряжениями можно пренебречь и использовать пластическую модель движения среды, считая тензоры давления и деформации шаровыми, описываемыми термодинамическими УРС. Поскольку скрытая теплота, энтропия и изменение плотности при плавлении составляет обычно несколько процентов и уменьшаются вдоль кривой плавления  $p_{\text{п}}(T)$ , теплофизические свойства и УРС твердого тела и жидкости в районе  $p_{\text{п}}(T)$  отличаются не сильно, и, как мы увидим ниже, описываются полуэмпирическими моделями (гл. 9).

В области своего существования (рис. 2.1, 2.2) поведение твердого тела характеризуется большим разнообразием и сугубой индивидуальностью свойств каждого структурного элемента, обусловленных конкретными особенностями электронного энергетического спектра атомов, молекул, ионов, составляющих кристаллическую решетку. В настоящее время предложено значительное количество способов квантово-механического описания электронных, термодинамических, фононных, магнитных, оптических и других характеристик твердого тела, а сами эти методы достигли высокой степени совершенства.

Мы остановимся в основном на рассмотрении результатов расчета термодинамических свойств веществ в возможно более широком интервале давлений и температур и лишь кратко обсудим качественные особенности примененных методик, отсылая за более подробными сведениями к оригинальным статьям и специализированным монографиям и обзорам [5–7].

При термодинамическом описании твердого тела выделяют фоннные и электронные составляющие [5], которые рассматриваются в значительной степени независимо, это так называемое адиабатическое приближение или приближение Бора–Оппенгеймера. Наибольшее количество расчетов электронных спектров выполнено в рамках зонной модели, в которой кристалл представляется идеальной периодической структурой с неподвижными ядрами в узлах ячеек, а каждый электрон движется в периодическом самосогласованном потенциале, создаваемом ионным остовом и остальными электронами, что позволяет выразить волновую функцию всей системы через одноэлектронные блоховские функции [6]. Основное различие моделей зонной структуры сводится к способам вычисления этих одноэлектронных функций внутри элементарных атомных ячеек, на которые разбивается все вещество, и методам сшивания решений на границе.

В общем виде квантово-статистическое описание термодинамических свойств вещества требует введения аппарата матрицы плотности и применения различных статистических приближений. Наиболее часто используется приближение большого канонического ансамбля [8].

Если задана матрица плотности системы  $\widehat{W}$ , то среднее значение физической величины  $F$  можно представить в виде [9]

$$\langle \widehat{F} \rangle = \text{Sp} (\widehat{W} \widehat{F}), \quad (3.1)$$

где  $\widehat{F}$  — оператор, соответствующий величине  $F$ .

Наиболее общим вариационным принципом, который обычно применяется в условиях равновесия для большого канонического ансамбля, является требование минимума большого термодинамического потенциала:  $\Omega = E - \mu N - TS$ , где  $\mu$  — химический потенциал системы,  $T$  — температура. Совместное квантово-механическое рассмотрение системы взаимодействующих ионов и электронов приводит к не преодоленным до сих пор трудностям, поэтому обычно используется упоминавшееся выше адиабатическое приближение. В нем ионы рассматриваются как классические частицы, движущиеся гораздо медленнее электронов, так как предполагается, что при каждом новом положении ионов электроны быстро приходят в термодинамическое равновесие. Согласно уравнению (3.1), большой термодинамический потенциал системы электронов и ионов записывается следующим образом:

$$\Omega = \langle \widehat{\Omega} \rangle = \text{Sp} \left[ \widehat{W} (\widehat{H} - \mu \widehat{N} + T \ln \widehat{W}) \right]. \quad (3.2)$$

Здесь  $\hat{H}$  — гамильтониан системы электронов,  $\hat{N}$  — оператор числа частиц, а оператор плотности  $\hat{W}$  можно записать следующим образом:

$$\hat{W} = \frac{\exp\left(-\frac{\hat{H} - \mu\hat{N}}{T}\right)}{\text{Sp} \exp\left(-\frac{\hat{H} - \mu\hat{N}}{T}\right)}. \quad (3.3)$$

В нерелятивистском приближении можно определить классическую функцию Гамильтона как функцию только координат и импульсов всех частиц системы. Если пренебречь всеми спиновыми взаимодействиями электронов и всеми ядерными эффектами (например, конечностью размеров и массы ядра), то гамильтониан системы электронов запишется в виде

$$\hat{H} = \sum_i \left[ -\frac{1}{2}\Delta_i + U_a(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right], \quad (3.4)$$

где  $U_a(\mathbf{r}_i)$  — потенциальная энергия  $i$ -го электрона с координатами  $\mathbf{r}_i$  в заданном потенциале атомных ядер  $V_a(\mathbf{r})$ , т. е.  $U_a(\mathbf{r}_i) = -V_a(\mathbf{r}_i)$ . Тогда среднее значение оператора  $\hat{\Omega} = \hat{H} - \mu\hat{N} + \theta \ln \hat{W}$  вычисляется по формуле

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \text{Sp}(\hat{W}\hat{\Omega}) = \sum_n w_n \int \Psi_n^*(Q) \hat{\Omega} \Psi_n(Q) dQ, \quad (3.5)$$

где  $w_n = w(E_n, N_n)$  — статистическая вероятность состояния системы электронов с заданной энергией  $E = E_n$  и числом частиц  $N = N_n$ ,  $\Psi_n(Q)$  — волновая функция такого состояния,  $Q$  — набор координат электронов  $q_i$ , где  $q_i$  включает в себя пространственную  $\mathbf{r}_i$  и спиновую  $\sigma_i$  переменные электрона с номером  $i$ . Интегрирование по всему конфигурационному пространству  $Q \equiv \{q_i\}$  означает интегрирование по всем пространственным координатам  $\mathbf{r}_i$  и суммирование по всем спиновым переменным  $\sigma_i$ . Среднее значение любой величины, как видно из уравнения (3.5), вычисляется в два приема: сначала ищется среднее значение рассматриваемой величины в состоянии с волновой функцией  $\Psi_n(Q)$  при заданных энергии  $E_n$  и числе частиц  $N_n$ , а затем полученные значения усредняются по различным состояниям с весом, равным вероятности  $w_n$  этих состояний.

Уравнения Хартри-Фока можно получить, используя следующие приближения.

1. Волновые функции  $\Psi(Q)$  представляются в виде антисимметризованной суммы произведений одночастичных ортонормированных волновых функций по заполненным состояниям  $\nu_i$  (детерминант Слэтера в приближении Хартри-Фока),  $\Psi(Q) = 1/\sqrt{N!} \det\{\psi_{\nu_i}(q_j)\}$ ,  $i, j = 1, \dots, N$ .
2. Одночастичные состояния  $\nu$  заполнены с некоторыми вероятностями  $n_\nu$  ( $0 \leq n_\nu \leq 1$ ), которые вблизи равновесного состояния можно приближенно считать независимыми [10].

Тогда, варьируя среднее значение большого термодинамического потенциала (3.5) при условиях нормировки  $\int |\psi_\nu(q)|^2 dq = 1$  и ортогональности,

$\int \psi_\nu^*(q)\psi_\lambda(q) dq = 0$  при  $\lambda \neq \nu$ , можно получить уравнения Хартри–Фока для вещества с заданной температурой и плотностью [11]:

$$\hat{H}_0\psi_\nu(q) + \frac{1}{n_\nu} \sum_{\lambda \neq \nu} \Lambda_{\nu\lambda}\psi_\lambda(q) = -\frac{\Lambda_{\nu\nu}}{n_\nu}\psi_\nu(q) \equiv \varepsilon_\nu\psi_\nu(q), \quad (3.6)$$

$$n_\nu = n(\varepsilon_\nu) = \frac{1}{1 + \exp \frac{\varepsilon_\nu - \mu}{\theta}}, \quad (3.7)$$

где

$$\hat{H}_0\psi_\nu(q) = \left[ -\frac{1}{2}\Delta - V_a(\mathbf{r}) + \sum_\lambda n_\lambda \int \frac{|\psi_\lambda(q')|^2 dq'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \psi_\nu(q) - \sum_\lambda n_\lambda \int \frac{\psi_\lambda^*(q')\psi_\nu(q') dq'}{\mathbf{r} - \mathbf{r}'} \psi_\lambda(q). \quad (3.8)$$

Уравнения (3.6)–(3.8) впервые были получены Мацубарой [12]. При решении системы уравнений (3.6)–(3.8) возникают сложности, связанные с последним членом в правой части гамильтониана (3.8) так называемым обменным взаимодействием. Используя квазиклассическое приближение, можно провести приближенный учет обменных эффектов и получить единый эффективный потенциал для всех электронов. Впервые учет обменных эффектов в локальном приближении для свободного атома при нулевой температуре провел Слэтер [13]. Выражения для ненулевой температуры были получены в работах [14, 15]. Так, интерполяционное выражение для обменного потенциала из работ [11, 14] выглядит следующим образом:

$$V_{\text{ex}} = \frac{\pi\rho(\mathbf{r})}{\theta} \left[ 1 + 5,7 \frac{\rho(\mathbf{r})}{\theta^{3/2}} + \frac{\pi^4}{3} \cdot \frac{\rho^2(\mathbf{r})}{\theta^3} \right]^{-1/3}, \quad (3.9)$$

где  $\rho(\mathbf{r})$  — плотность электронов. При замене обменного члена в гамильтониане (3.8) на  $V_{\text{ex}}$  из системы уравнений (3.6)–(3.8) получается система уравнений Хартри–Фока–Слэтера. Исключение обменного члена из (3.8) приводит к системе уравнений Хартри.

Система уравнений Хартри–Фока позволяет, в принципе, рассчитать одночастичные волновые функции  $\psi_\nu(q)$  при заданном положении ядер и заданном значении химического потенциала  $\mu$ , который определяется из условия электронейтральности системы электронов и ионов в веществе. Однако на практике провести вычисления для исходной системы уравнений невозможно. Это связано с тем фактом, что минимизация большого термодинамического потенциала (3.5) производится при варьировании всех волновых функций системы, что приводит к экспоненциальному росту размерности пространства варьируемых параметров [16]. Кроме того, при достаточно большом числе электронов невозможно вычислить волновые функции системы с достаточно приемлемой точностью. В работе [16] данное явление названо «экспоненциальным барьером». Таким образом, необходимо введение дальнейших упрощений при решении системы уравнений Хартри–Фока. Традиционно вместо потенциала  $V(\mathbf{r})$  при заданном положении ядер находят средний потенциал

вблизи рассматриваемого ядра, осредняя  $V(\mathbf{r})$  по различным положениям других ядер. При отсутствии выделенного направления средний потенциал считается сферически симметричным,  $V(r)$ , а волновые функции в этом потенциале при заданном значении энергии  $\varepsilon_\alpha = \varepsilon$  записываются в виде

$$\Psi_{\varepsilon l m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} R_{\varepsilon l}(r) (-1)^m Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (3.10)$$

где радиальная функция  $R_{\varepsilon l}(r)$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{1}{2}R \gg_{\varepsilon l} + \left[ -V(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] R_{\varepsilon l}(r) = \varepsilon R_{\varepsilon l}(r), \quad (3.11)$$

$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  — сферические функции. Таким образом, атом помещается в сферическую ячейку радиусом  $r_0$ , а влияние остальных атомов учитывается с помощью граничных условий. При  $r = 0$  для радиальной функции должно быть выполнено граничное условие  $R_{\varepsilon l} = 0$ . При постановке условий на границе ячейки возможны различные подходы. Для низкотемпературной плазмы малой плотности выбирают  $R_{\varepsilon l}(r_0) = 0$ , это так называемая модель ограниченного атома (гл. 4). Для твердотельных плотностей наиболее адекватными являются условия Блоха на границе сферической ячейки.

Термодинамические функции электронов для моделей Хартри, Хартри–Фока и Хартри–Фока–Слэтера в сферической ячейке можно найти путем дифференцирования большого термодинамического потенциала  $\Omega$ :

$$P_e = -\frac{\Omega}{v}, \quad (3.12)$$

$$E_e = -\Omega - T \frac{\partial \Omega}{\partial T} - \mu \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad (3.13)$$

$$S_e = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}. \quad (3.14)$$

Здесь  $v = (4/3)\pi r_0^3$  — объем сферической ячейки. Соответствующие формулы можно найти в монографии [11].

Упрощение модели Хартри–Фока можно получить путем разложения электронной плотности по степеням постоянной Планка  $\hbar$  [17]. Такая модель получила название модели Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками (ТФП) [17–19] и сводится к решению краевой задачи для самосогласованного потенциала  $V(r)$  и поправки к нему  $\delta V(r)$ . Поправка к потенциалу приводит к появлению соответствующих поправок к термодинамическим функциям [19, 20], которые в модели ТФП являются автомодельными. Это позволило составить подробные таблицы расчетов в модели ТФП [19]. Если же пренебречь квантовыми и обменными поправками в модели ТФП, то получится конечно-температурная модель Томаса–Ферми [21]:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rV) = \frac{2}{\pi} (2\theta)^{3/2} I_{1/2} \left( \frac{V(r) + \mu}{T} \right), \quad 0 < r < r_0, \quad (3.15)$$

с граничными условиями

$$rV(r)|_{r=0} = Z, \quad V(r_0) = 0, \quad \left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0. \quad (3.16)$$

Квантово-статистические модели широко используются для расчетов различных свойств плазмы в экстремальных состояниях [11, 18, 22]. Тем не менее, приближения, сделанные при формулировке моделей, в частности, использование сферической ячейки и пренебрежение корреляционными эффектами, приводят к существенным ошибкам в области умеренных плотностей и температур. В настоящее время в этой области параметров значительно чаще применяется метод функционала плотности (см. гл. 7).

Откладывая описание свойства квазиклассических моделей ТФ, ТФП и метода функционала плотности до гл. 6 и 7, продолжим обсуждение квантовомеханических моделей твердого тела.

С ростом сжатия твердые тела имеют тенденцию переходить в плотноупакованные высокосимметричные кристаллические структуры, что оправдывает применение в этом случае модели сферических ячеек Вигнера–Зейтца. В соответствии с этой моделью полная самосогласованная задача в кристалле сводится к решению волнового уравнения (3.6)–(3.8) в одной ячейке с блоховскими граничными условиями [6], при выполнении которых вместо дискретного спектра энергии для свободного атома возникают зоны разрешенных состояний. Связь давления с волновыми функциями на поверхности ячейки позволяет определить уравнение состояния системы. Даже упрощенные расчеты в модели сферических ячеек [23, 24], выполненные без учета обменных эффектов (в (3.6)–(3.8) опущен член  $G_{nl}(r)$ ), позволили выявить индивидуальные свойства элементов, определить структуру и характер заполнения электронных энергетических зон. В отличие от статистической модели (см. гл. 6) зонная теория смогла передать ряд качественных эффектов периодической системы, как, например, различную сжимаемость и нормальную плотность соседних по таблице элементов. Простейшая модель образования зон будет рассмотрена в гл. 4. Учет индивидуальных особенностей заполнения энергетических полос приводит к неплавности и даже немонотонности в поведении характеристик металлов при сжатии, что фиксируется в динамических экспериментах как изменение ударной сжимаемости [25].

При учете в рамках зонной модели обменных эффектов возникают значительные вычислительные трудности, вызванные необходимостью решения системы интегро-дифференциальных уравнений. Приближенный учет обмена, при котором в уравнениях Хартри–Фока реальный нелокальный обменный потенциал заменяется на усредненный локальный, был впервые предложен Слэтером и в дальнейшем получил развитие как метод «X- $\alpha$ » [6]. На основе этого метода были проведены расчеты термодинамических характеристик конденсированной фазы веществ при высоких давлениях и температурах [26]. Дальнейшая разработка подобного способа описания обменных эффектов осуществлена в работе [27], где предложено выражение эффективного обменного потенциала для случая произвольных температур и плотностей.

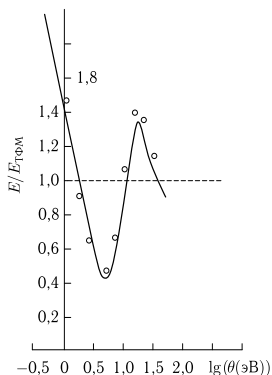


Рис. 3.1. Отношение энергии плазмы лития по модели Хартри–Фока–Слэтера [27] к энергии по модели ТФМ [28, 29] при давлении  $p = 1$  кбар. Значки — расчет по химической модели

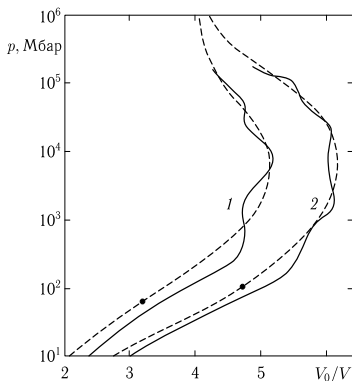


Рис. 3.2. Ударные адиабаты меди (1) и свинца (2) [30, 31]. Сплошные линии — расчет по модели Хартри–Фока–Слэтера, штриховые — расчет по модели ТФП и интерполяция [32]

Выполненные по модели Хартри–Фока–Слэтера расчеты [27, 30, 31] показали существенно лучшее совпадение с экспериментальными данными и результатами плазменных расчетов, чем в квазиклассической модели. Для всех полученных зависимостей характерны осцилляции относительно данных квазиклассических моделей, причем осцилляции имеют место до тех пор, пока в системе есть оболочки. Следует отметить, что поправки на оболочечные эффекты существенны и там, где значения обменных и квантовых поправок к модели Томаса–Ферми малы. Как видно из рис. 3.1, значение энергии плазмы лития при  $T \approx 5$  и 16 эВ меняется с учетом оболочек более чем вдвое, хотя расчеты по модели Томаса–Ферми и ее модификациям практически совпадают. Аналогично представленные на рис. 3.2, ударные адиабаты меди и свинца заметно отличаются от квантово-статистических при давлениях, существенно превышающих традиционную граничную оценку в 300 Мбар [32], что указывает на необходимость учета оболочечных эффектов вплоть до экстремальных температур и давлений. Вместе с тем из рис. 3.2 следует и резкое отличие расчетных ударных адиабат от экспериментальных при пониженных ( $p \leq 10$  Мбар) давлениях, указывающее на недостаточную точность модели Хартри–Фока–Слэтера в этой области.

### 3.2. Несферичность ячеек

Для описания свойств твердого тела при нормальных условиях приближение сферических ячеек является слишком схематичным, так как элементар-

ные ячейки реальных кристаллов имеют значительно более сложную форму, в особенности для структур с низкими координационными числами. Кроме того, при низких давлениях увеличивается относительный вклад в уравнение состояния веществ обменного и корреляционного членов, что приводит к необходимости более строгого их учета. Выполненный в приближении Хартри–Фока расчет внутриячеечного обменного взаимодействия при  $T = 0\text{ К}$  и малых сжатиях, а также оценка вклада корреляционных поправок и эффектов межъячеечного обмена показали их существенное влияние на расчетные характеристики, что вообще ставит под сомнение вопрос о целесообразности проведения в данной области расчетов в сферическом приближении [33]. Эти обстоятельства потребовали разработки новых эффективных методов самосогласованного расчета не сферических структур в области низких давлений.

В реальных кристаллах ионы занимают ограниченный объем атомной ячейки, особенно при малых степенях сжатия. Для описания такой ситуации пространство кристалла разбивается на области, отличающиеся способом отыскания решений уравнения Шредингера. Разбиение позволяет одновременно выполнить граничные условия на поверхности сложной по форме элементарной ячейки Вигнера–Зейтца и учесть отличие потенциала решетки от атомного. Это достигается с помощью введения так называемого МТ-потенциала [34] (название дано по форме потенциала, от англ. muffin-tin — жестянка для выпекания пудинга), сферически симметричного в окрестности иона, где волновая функция является комбинацией решений уравнения Шредингера в центральном поле, постоянном в межузельном пространстве, с решением в виде линейной комбинации плоских волн. Оба решения сшиваются на граничной сфере внутри ячейки, что приводит к присоединенной плоской волне.

Квантово механические расчеты методом присоединенных плоских волн являются более трудоемкими по сравнению с приближением сферических ячеек и относятся главным образом к структурам при нормальных условиях, в то время как численные результаты для высоких давлений здесь значительно более скромны. На рисунке 3.3, приведено для алюминия сопоставление результатов расчета по этой модели с данными квазиклассических приближений. Характерные немонотонности расчетной кривой вызваны переходом в непрерывный спектр  $L$  и  $K$  оболочек при давлениях 50–750 и  $10^4$ – $10^6$  Мбар. Видно, что модель [35] предсказывает заметные отличия от простейших вариантов квазиклассического приближения при давлениях, существенно превышающих оцененные в работе [32] границы применимости модели Томаса–Ферми.

Комбинация метода присоединенных плоских волн и « $X$ - $\alpha$ » метода использовалась [36–38] для определения высокотемпературного уравнения состояния йода и исследования особенностей изоструктурного фазового перехода в цезии. В сочетании с вариационным методом описания жидкости (гл. 6) этим методом был выполнен [39] расчет уравнения состояния конденсированного ксенона и получены оценки критических значений объема и давления, соответствующих его металлизации при сжатии ( $V \approx 10\text{ см}^3/\text{моль}$ ,  $p \approx 1,5\text{ Мбар}$ ). Расчетные характеристики показали хорошее совпадение с результатами экспериментов при низких и высоких давлениях, что, в частности,

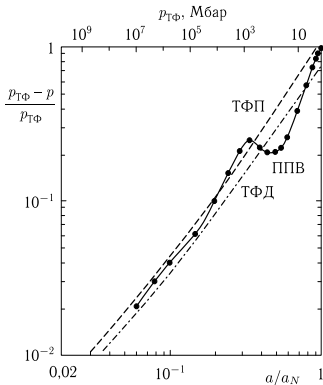


Рис. 3.3. Уравнение состояния алюминия ( $T = 0 \text{ K}$ ) [35]. Расчет: TФД — модель Томаса–Ферми–Дирака, TФП — модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками, ППВ — модель присоединенных плоских волн,  $\alpha$  — параметр решетки

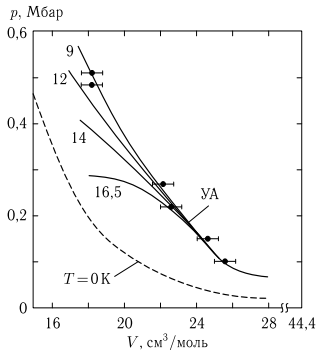


Рис. 3.4. Ударная адиабата и нулевая изотерма конденсированного ксенона [6]. Значки — эксперимент, цифры у расчетных кривых соответствуют различным объемам металлизации ксенона при сжатии

иллюстрирует рис. 3.4, на котором показана чувствительность хода расчетной ударной адиабаты ксенона к различным значениям объема металлизации. Недавно были выполнены независимые эксперименты по измерению поглощения оптического излучения в конденсированном ксеноне при сжатии на алмазных наковальнях [40]. Интересно, что полученная зависимость ширины энергетической щели от объема также оказалась близка к расчетной [39] и предсказывает металлизацию при  $p \approx 2 \text{ Мбар}$ .

Существенные вычислительные трудности, возникающие при использовании метода присоединенных плоских волн, особенно для случая ненулевых температур, привели к широкому использованию в конкретных расчетах несколько менее точного, но значительно более экономичного в вычислительном отношении метода линейных МТ-орбиталей [41]. Этот способ зонных расчетов, используемый обычно в случае плотно упакованных структур, самосогласованно учитывает обменно-корреляционные эффекты в приближении локальной плотности [42, 43]. Применение метода линейных МТ-орбиталей позволило в широком интервале давлений и температур количественно верно описать для многих металлов экспериментально наблюдаемые тонкие характеристики поверхности Ферми и ряд особенностей уравнений состояния, объясняемых последовательностью заполнения электронных энергетических зон. Исходя из первых принципов и не используя никаких входных параметров, кроме атомного номера, метод тем не менее обладает высокой точностью описания. Например, проведенные с его помощью расчеты нормальной плотности

и модуля объемного сжатия дают совпадающие с экспериментом, с точностью порядка 5 и 10%, соответственно, значения.

Методом линейных МТ-орбиталей были выполнены расчеты уравнений состояния лантана [44], тория [45], кальция [46], серебра [47], показавшие хорошее совпадение с данными статических и динамических экспериментов от нормальных условий до мегабарных давлений. На рис. 3.5, приведено сопоставление расчетной нулевой изотермы кальция [46] с ударно-волновыми данными, причем отметим, что помимо правильного описания уравнения состояния расчет дает также совпадение интервала давлений, соответствующего переходу кальция в полуметалл, с экспериментальным. Объяснением этого перехода служит перестройка электронной структуры, приводящая при  $V = 0,78V_0$  к резкому уменьшению плотности состояний (в МТ-методе) на поверхности Ферми, и только увеличение числа  $d$  — состояний со сжатий  $V = 0,54V_0$  — восстанавливает металлические свойства.

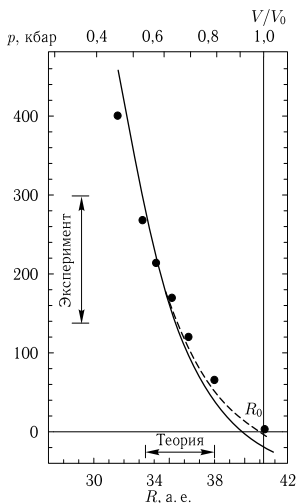


Рис. 3.5. Уравнение состояния кальция [46]. Значки — ударно-волновой эксперимент, сплошная линия — расчет, штриховая — учет нелокальных поправок. Отмечены расчетный и экспериментальный интервалы, соответствующие переходу кальция в полуметалл

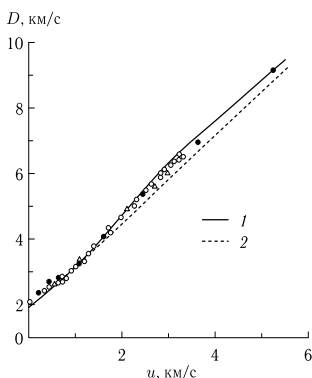


Рис. 3.6. Ударная адиабата лантана [48, 49]. Расчет: 1 — метод линейных МТ-орбиталей, учитывающий  $6s-5d$  электронный переход; 2 — уравнение состояния Ми-Грюнаузена ( $\gamma/V = \text{const}$ ). Значки — эксперимент

Использование метода линейных МТ-орбиталей для расчета зонной структуры при нормальном и повышенном давлении дало объяснение закономерностям перераспределения электронов и изменения характера электронных состояний в цезии [50], переходных металлах [51], лантанидах [44, 52] и актинидах [45, 53, 54]. Подробно термодинамические следствия этих изменений рассматриваются в гл. 5, здесь мы лишь приводим рис. 3.6, на котором показаны экспериментальные данные по ударному сжатию лантана и результаты расчета [44], согласно которому крутой ход ударной адиабаты при  $u \gtrsim 1$  км/с объясняется завершением  $6s-5d$  — электронного перехода.

Все расчеты методами зонной теории проводятся в приближении статической решетки, что вызывает значительные трудности при попытке выхода за рамки адиабатического приближение и согласованного учета колебаний атомов кристалла. Влияние температуры на электронные члены в модели учитывается путем усреднения расчетных характеристик по фермиевскому распределению [36–38, 44], а тепловой вклад атомов решетки определяется на основе холодной кривой [44, 50] в приближении различных квазигармонических моделей, упрощенно описывающих реальный спектр колебаний. Это приводит к фактически неразрешимым трудностям при попытке описать в рамках ячеечной модели характеристики металла вблизи кривой фазового перехода (лантан [44], цезий [50]), где необходимо учитывать именно тонкие особенности фононного спектра — потерю устойчивости одной из мод колебаний.

### 3.3. Псевдопотенциальные модели

В непериодических металлах ионы занимают небольшую часть ( $\approx 10\%$ ) объема атомной ячейки, и при движении в металле валентные электроны малую часть времени находятся в занятой ионом области. Так как характеристики металла практически не зависят от особенностей поведения электронов проводимости внутри ионного остова, то оказалось возможным истинный потенциал взаимодействия с многоэлектронным ионом заменить на упрощенный одночастичный. Такой псевдопотенциал должен сохранять рассеивающие свойства исходного иона, однако внутри него может быть существенно слабее истинного потенциала. Введение псевдопотенциала позволяет определить малый параметр теории  $U_k/\varepsilon_F$  ( $U_k$  — фурье-компонента псевдопотенциала в точке вектора обратной решетки), дающий возможность применения теории возмущений [55]. Таким образом, в псевдопотенциальной теории металл рассматривается как вырожденная плотная плазма, причем фононы представляют собой низкочастотные коллективные возбуждения относительно основного состояния, соответствующего регулярному расположению ионов.

Первые успехи в количественном описании свойств металлов на основе псевдопотенциальной модели были достигнуты в рамках различных одночастичных приближений, непослдовательным образом учитывающих многочастичность задачи. Недостатком подобных моделей является учет только парного взаимодействия и игнорирование существенного косвенного взаимодействия трех и большего числа ионов через электроны проводимости. Последовательная теория псевдопотенциала, учитывающая эффективное двух-, трех- и т. д.-ионное взаимодействие, представляет собой строгое разложение в ряд

по параметру электрон-ионного взаимодействия [7]. Использование много-частичного формализма позволяет одновременно со статическими свойствами металла определять также его динамические характеристики — фононный спектр.

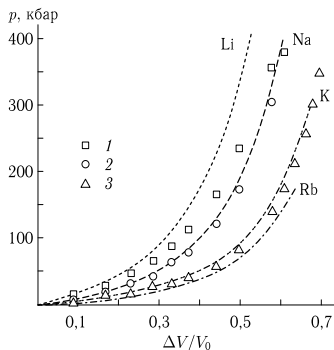


Рис. 3.7. Нулевые изотермы щелочных металлов [56–58]. Экспериментальные точки по данным ударноволновых измерений: 1 — Li, 2 — Na, 3 — K

Применение такого подхода к непереходным металлам позволило в рамках единой схемы описать фононный спектр во всей области фазового пространства, упругие константы и уравнение состояния [7, 56–60] (рис. 3.7), а также определить энергию, параметры решетки, выбрать тип наиболее выгодных кристаллических структур и проанализировать влияние давления на ангармонизм решетки [7, 56–58]. Особенно успешным оказалось использование метода псевдопотенциала при расчете уравнения состояния металлического водорода [61], у которого ион не имеет электронной оболочки, что дает возможность проводить

вычисления до высоких степеней сжатия. Расчеты термодинамических характеристик водорода выполнялись до членов четвертого порядка по параметру электрон-ионного взаимодействия, причем уравнение состояния находилось для всех конкурирующих по энергии структур.

Применение псевдопотенциального подхода при высоких давлениях ограничено перекрытием ионных остовов и отсутствием необходимых экспериментальных данных для построения псевдопотенциала сжатого вещества. Согласно работам [7, 56–58], верхняя граница применимости псевдопотенциальной модели для щелочных и щелочноземельных металлов находится на уровне давлений в сотни килобар, ниже которого эффекты искажения псевдопотенциала, по-видимому, мало существенны и влияние сжатия сводится лишь к изменению электронной плотности.

С помощью псевдопотенциальной модели в работе [62] были получены полуэмпирические уравнения состояния натрия и алюминия, описывающие ударные данные до давления  $p \approx 1$  Мбар. Выбором параметров потенциала [56–58] удалось удовлетворительно рассчитать ударную сжимаемость галогенидов щелочных металлов вне области их полиморфных переходов. Добавим, что найденные в квазиклассическом приближении метода Хартри–Фока уравнения состояния ионных кристаллов и рассчитанные с их помощью ударные адиабаты [63, 64] хорошо соответствуют опытным данным до давления порядка 1 Мбар, выше которого становятся существенными ангармонизм и термическое возбуждение электронов.

## Список литературы

1. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
2. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
3. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / *Канель Г., Разоренов С., Уткин А., Фортов В.* — М.: Янус-К, 1996.
4. *Канель Г. И., Фортов В. Е., Разоренов С. В.* Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. — 2007. — Т. 177, № 8. — С. 809.
5. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1975. — Т. 1,2.
6. *Займан Д.* Вычисление блоховских функций. — М.: Мир, 1973.
7. *Бровман Е. Г., Каган Ю. М.* Фононы в непереходных металлах // УФН. — 1974. — Т. 112, № 3. — С. 369.
8. *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. — М.: Мир, 1978. — Т. 1.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. В 2-х ч. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
10. *Киржниц Д. А.* Полевые методы теории многих частиц. — М.: Госатомиздат, 1963.
11. *Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробогов и уравнений состояния. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000.
12. *Matzubara T.* A new approach to quantum-statistical mechanics // Progr. of Theoret. Phys. — 1955. — V. 14, No. 4. — P. 351.
13. *Slater J. C.* A Simplification of the Hartree-Fock Method // Phys. Rev. — 1951. — V. 81, No. 3. — P. 385.
14. *Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б.* Модифицированная модель Хартри–Фока–Слэтера для веществ с заданной температурой и плотностью // Вопр. атомной науки и техники. Методики и программы числ. решения задач мат. физики. — 1979. — № 4(6). — С. 16.
15. *Gupta U., Rajagopal A. K.* Inhomogeneous electron gas at nonzero temperatures: Exchange effects // Phys. Rev. A. — 1980. — V. 21, No. 6. — P. 2064.
16. *Kohn W.* Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals // Rev. Mod. Phys. — 1999. — V. 71, No. 5. — P. 1253.
17. *Киржниц Д. А.* Квантовые поправки к уравнению Томаса–Ферми // ЖЭТФ. — 1957. — Т. 32, № 1. — С. 115.
18. *Киржниц Д.* Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489.
19. *Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В.* Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. Препр. ИПМ АН СССР № 35. — М.: ИПМ АН СССР, 1975.
20. *Киржниц Д. А.* О границах применимости квазиклассического уравнения состояния вещества // ЖЭТФ. — 1958. — Т. 35, № 6. — С. 1545.
21. *Feynman R. P., Metropolis N., Teller E.* Equations of State of Elements based on the Generalized Fermi-Thomas Theory // Phys. Rev. — 1949. — V. 75, No. 10. — P. 1561.
22. *Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В.* Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3.

23. Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г. Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // УФН. — 1970. — Т. 100, № 2. — С. 193.
24. Альтшулер Л. В., Воропинов А. И., Гандельман Г. М. и др. // ФММ. — 1981. — Т. 51. — С. 76.
25. Альтшулер Л. В., Баканова А. А. Электронная структура и сжимаемость металлов при высоких давлениях // УФН. — 1968. — Т. 96, № 2. — С. 193.
26. Rozsnyai B. F. Relativistic Hartree-Fock-Slater Calculations for Arbitrary Temperature and Matter Density // Phys. Rev. A. — 1972. — V. 5, No. 3. — P. 1137.
27. Препринт ИПМ АН СССР № 172 / Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Орлов Ю. Н., Уваров В. Б. — М., 1979.
28. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Препринт ИПМ АН СССР № 35. — М.: ИПМ АН СССР, 1975.
29. Калиткин Н. Н. Докт. диссертация. — ИПМ АН СССР, 1975.
30. Синько Г. В. // Численные методы механики сплошной среды. — 1979. — Т. 10, № 1. — С. 124.
31. Синько Г. В. // Численные методы механики сплошной среды. — 1981. — Т. 12, № 1. — С. 121.
32. Альтшулер Л. В., Калиткин Н. Е., Кузьмина Л. В., Чекин Б. С. // ЖЭТФ. — 1977. — Т. 72. — С. 317.
33. Дмитриев Н. А., Подвальный В. Г. // ФММ. — 1981. — Т. 52. — С. 28.
34. Slater J. C. // Advances in Quantum Chemistry. — N.Y.: Academic Press, 1972. — V. 6. — P. 1.
35. McMahan A. K., Ross M. // High Pressure Science and Technology / Ed. by K. D. Timmerhaus, M. S. Barber. — N.Y.: Plenum Press, 1979. — V. 2. — P. 920.
36. McMahan A. K., Ross M. High-temperature electron-band calculations // Phys. Rev. B. — 1977. — V. 15, No. 2. — P. 718.
37. McMahan A. K., Hord B. L., Ross M. Experimental and theoretical study of metallic iodine // Phys. Rev. B. — 1977. — V. 15, No. 2. — P. 726.
38. McMahan A. K. Calculation of the electronic transition in cesium // Phys. Rev. B. — 1978. — V. 17, No. 4. — P. 1521.
39. Ross M., McMahan A. K. Condensed xenon at high pressure // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1658.
40. Asaumi K., Mori T., Kondo Y. Effect of Very High Pressure on the Optical Absorption Edge in Solid Xe and Its Implication for Metallization // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 49, No. 11. — P. 837.
41. Andersen O. K. Linear methods in band theory // Phys. Rev. B. — 1975. — V. 12, No. 8. — P. 3060.
42. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. — 1964. — V. 136, No. 3B. — P. B864.
43. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. — 1965. — V. 140, No. 4A. — P. A1133.
44. McMahan A. K., Skriver H. L., Johansson B. The *s-d* transition in compressed lanthanum // Phys. Rev. B. — 1981. — V. 23, No. 10. — P. 5016.
45. Skriver H. L., Jan J. P. Electronic states in thorium under pressure // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1489.
46. Jan J. P., Skriver H. L. // J. Phys. Ser. F. — 1981. — V. 11. — P. 805.
47. Perrot F. // Phys. Stat. Sol. Ser. B. — 1980. — V. 101. — P. 741.
48. Perrot F. Zero-temperature equation of state of metals in the statistical model with density gradient correction // Physica A. — 1979. — V. 98, No. 3. — P. 555.

49. *Perrot F.* Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations // *Phys. Rev. A.* — 1979. — V. 20, No. 2. — P. 586.
50. *Glötzel D., McMahan A. K.* Relativistic effects, phonons, and the isostructural transition in cesium // *Phys. Rev. B.* — 1979. — V. 20, No. 8. — P. 3210.
51. *Poulsen U. K., Kollar J., Andersen O. K.* // *J. Phys. Ser. F.* — 1976. — V. 6. — P. L241.
52. *Glötzel D.* // *J. Phys. Ser. F.* — 1978. — V. 8. — P. L163.
53. *Skriver H. L., Andersen O. K., Johansson B.* Calculated Bulk Properties of the Actinide Metals // *Phys. Rev. Lett.* — 1978. — V. 41, No. 1. — P. 42.
54. *Skriver H. L., Andersen O. K., Johansson B.* 5f-electron Delocalization in Americium // *Phys. Rev. Lett.* — 1980. — V. 44, No. 18. — P. 1230.
55. *Хейне В., Коэн М., Уэйр Д.* Теория псевдопотенциала. — М.: Мир, 1973.
56. *Вакс В. Г., Кравчук С. П., Трефилов А. В.* // *ФТТ.* — 1977. — Т. 19. — С. 1271.
57. *Вакс В. Г., Кравчук С. П., Трефилов А. В.* // *ФТТ.* — 1977. — Т. 19. — С. 3396.
58. *Вакс В. Г., Кравчук С. П., Трефилов А. В.* // *ФТТ.* — 1977. — Т. 21. — С. 3370.
59. *Sarkar S. K., Sen D.* // *J. Phys. Ser. F.* — 1981. — V. 11. — P. 377.
60. *Sen D., Sarkar S. K.* Pseudopotential study of alkali metals: Unified approach // *Phys. Rev. B.* — 1980. — V. 22. — P. 1856.
61. *Каган Ю., Пушкарев В. В., Холас А.* // *ЖЭТФ.* — 1977. — Т. 73. — С. 967.
62. *Demarest Jr. H. H.* Lattice model calculation of hugoniot curves and the grüneisen parameter at high pressure for the alkali halides // *J. of Physics and Chemistry of Solids.* — 1974. — V. 35, No. 10. — P. 1393.
63. *Жданов В. А., Поляков В. В.* // *ПМТФ.* — 1976. — № 5. — С. 123.
64. *Жданов В. А., Поляков В. В.* // *ПМТФ.* — 1979. — № 4. — С. 102.

**ТЕРМОДИНАМИКА ПЛАЗМЫ****4.1. Исторические замечания**

Термодинамические свойства сжатого и разогретого вещества, находящегося в ионизированном — плазменном состоянии, всегда представляли большой интерес с принципиальной и прикладной точек зрения. Плотная горячая плазма является наиболее распространенным состоянием вещества во Вселенной — на ее долю приходится более 95% видимой нами материи, находящейся в звездах, планетах и экзоплантах [1, 2].

С повышением температуры газа происходит диссоциация нейтральных частиц. Такую плазму иногда называют «электромагнитной» (в отличие от «кварк-глюонной» — гл. 12), подчеркивая ведущую роль в ней кулоновского межчастичного взаимодействия. Дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия проявляется в обширной области параметров состояния вещества. Эта же особенность кулоновского потенциала вызывает трудности теории [3, 4], не позволяя применить для плазмы обычный аппарат статистической теории газов ввиду расходимости соответствующих интегралов. Перегруппировка и суммирование наиболее расходящихся членов ряда теории возмущения приводят, однако, к конечным выражениям, учитывающим эффекты экранирования. В плотной плазме принципиально важную роль играют также квантовые эффекты, существенные в области сильных сжатий и, кроме того, обеспечивающие ее стабильность и правильную идеальную газовую асимптотику при низких температурах [4].

Описание теплофизических свойств плазмы требует корректного учета сильного коллективного межчастичного взаимодействия, эффектов вырождения, правильного разделения дискретного и непрерывного энергетических спектров, учета эффектов термической и плотностной ионизации и других сложных явлений в сжатой и разогретой химически реагирующей многокомпонентной среде. Эти явления определяют поведение вещества в обширной части фазовой диаграммы, занимая область от твердого тела и жидкости до нейтрального газа, покрывая фазовые границы плавления и кипения металлов, а также область перехода металл-диэлектрик. Последняя проблема сейчас получила значительное развитие в экспериментах по многократному (квазиизоэнтропическому) ударно-волновому сжатию диэлектриков и их металлизации в мегабарном диапазоне давлений, по электровзрыву проводников импульсным током, а также по диэлектризации сильно сжатых металлов [1, 2].

Как мы увидим ниже, стандартные теоретические методы термодинамического описания плазмы становятся неприменимыми в области высоких

плотностей и сильных неидеальностей. Из-за этого при создании термодинамических моделей приходится использовать определенные допущения и упрощения. Эти упрощения не являются универсальными, как как относительно значения физических факторов, определяющих макроскопические свойства плазмы, различается в областях с разной температурой и плотностью.

Часто речь идет об экстраполяциях модели вне области их формальной применимости. Поэтому в изучении термодинамики плазмы весьма важна роль эксперимента, к которому мы будем достаточно часто апеллировать в этой главе.

Сегодня изучение сильно сжатых кулоновских систем является одной из наиболее «горячих» и интенсивно развивающихся фундаментальных научных дисциплин, находящейся на стыке физики плазмы, конденсированного состояния, атомной и молекулярной физики с большим разнообразием стимулированных неидеальностью физических эффектов и постоянно расширяющимся набором объектов и состояний, где эта неидеальность играет определяющую роль.

Далее в этой главе мы будем ориентироваться на монографию [5] и коснемся лишь наиболее современных моделей описания уравнения состояния плазмы. Прежде чем перейти к анализу термодинамических соотношений для плазмы, сделаем несколько замечаний общего характера [5].

Общей моделью вещества как системы, образованной ядрами и электронами, мы обязаны Резерфорду (1911). Потенциал решетчатой, состоящей из точечных зарядов, впервые вычислил Эвальд (1921) и уточнил Вигнер (1932). Теорию экранирования зарядов ввели Дебай и Хюккель (1923) и позднее усовершенствовал Маке (1949), Майер (1950), Бом и Пайнс (1953), Линдхардт (1954), Мотт (1959), Веденов и Ларкин (1959), Кельбг и Де Витт (1963), Сингви, Този, Лэнд и Золандер (1968) и другие.

Теория заряженных частиц, безусловно, является самым важным разделом любой теории плазмы. Однако в общем случае плазма содержит как нейтральные, так и заряженные частицы в различных сочетаниях. Две элементарные теории плазмы рассматривают предельные случаи, в которых существуют только электрически нейтральные или заряженные частицы. В первом случае, соответствующем низким температурам и низким плотностям, все электроны остаются в связанном состоянии, плазма ведет себя как обычный нейтральный газ. Элементарная теория газов (гл. 2) восходит к классическим работам Ван-дер-Ваальса, проделанной около ста двадцати лет назад. Во втором случае теория опирается на работы Дебая и Хюккеля (1923).

Анализ частично ионизированной плазмы восходит к работам М. Н. Саха, который в 1921 году опубликовал в Берлине статью «*Versuch einer Theorie der physikalischen Erscheinungen bei hohen Temperaturen mit Anwendungen auf die Astrophysik*».

При высоких плотностях частиц теории Ван-дер-Ваальса и Дебая–Хюккеля не работают. Как мы видели в гл. 2 обобщения теории нейтрального газа на случай высоких плотностей разработали Перкус и Йевик (1962), Карнахан и Старлинг (1969), а также Росс и др. (1980, 1983). Обобщением теории Перкуса–Йевика на заряженные твердые сферы является средне-сферическое приближение (MSA), которое получили Вайсман и Лебовитц (1972), Триоли,

Григера и Блюм (1976). Обобщениями средне-сферического приближения мы обязаны Кихаре (1978), Паринелло и Този (1979), а также Розенфельду (1980).

Квантово-статистическая теория теплофизических свойств плазмы основана на методах, разработанных Монролом и Уордом (1958), Мартином и Швингером (1959), Веденовым и Ларкиным (1959), Абрикосовым, Горьковым и Дзялошинским (1962), Кадановым и Беймом (1962), Кельбгом (1963), Де Виттом (1963) и Марчем (1968). С помощью этих работ Копышев (1968) и Эбелинг (1968) получили точные результаты первых поправок для предельных законов. Точные результаты для нижних границ и свойства устойчивости термодинамических функций впервые получили Лайсон и Ленард (1967, 1968), Лебовитц и Либ (1969, 1972), Либ и Тирринг (1975). Решение проблем связанных состояний тесно связано с работами Мотта (1959), Ларкина (1960), Эбелинга (1966, 1968), Кремпа и Крефта (1968, 1972), Килиманна и др. (1977), Репке и др. (1978). Приближение случайных фаз восходит к работам Бома и Пайнса (1953), Линдхарда (1954), Нозьера и Пайнса (1958, 1959), Сингви, Този, Лэнда и Золандера (1968), Ичимару (1973).

Приближение Томаса–Ферми (гл. 6) и родственное ему приближение функционала плотности связаны с работами Хохенберга и Кона (1964), Киржница и др. (1975), Либа и Тирринга (1975), Перро (1982), Дарма-Вардана и др. (1982).

Другим направлением является методика кластерного разложения, которая хорошо работает в случае разреженной плазмы. Этот метод восходит к работам Кельбга (1963, 1964), Эбелинга (1968, 1969), Крефта и Кремпа (1968), Роджерса (1971, 1974), Зеленера, Нормана и Филинова (1981).

Метод квантово-статистического моделирования Монте–Карло (см. гл. 5) разрабатывали Цеперли и Олдер (1980, 1981), а также Замалин, Норман и Филинов (1977) и многие другие. Этот метод, имеет большие перспективы, но до сих пор находится в зачаточном состоянии и мы его рассмотрим в главе 5.

Расширенные вычисления теплофизических свойств плазмы, основанные на сочетании всех вышеупомянутых методов, были впервые разработаны двумя независимыми группами, расположенными в Москве и Черногоровке [6, 7] и в Ливерморе [8–11].

## 4.2. Иерархия моделей

В следующих параграфах мы попытаемся изложить основные методы вычисления теплофизических свойств плазмы.

Как и для описания твердого тела и жидкости (гл. 2, 3) в термодинамике плазмы используется весьма универсальное *адиабатическое приближение*. Оно справедливо при любых значениях плотности и температуры с точностью, пропорциональной отношению массы электрона  $m_e$  к массе ядра  $m$ . Основное допущение при этом заключается в том, что движение электрона можно рассматривать при неподвижном ядре. В результате можно получить потенциальную энергию, которая зависит исключительно от координат ядра, что позволяет отдельно описать движение ядра [12].

Следующим довольно общим приближением является допущение о классическом характере движения ядер (квантовой случай рассмотрен в п. 4.11), которое нарушается при низких температурах и высоких плотностях. Условием применимости является ограничение, которое накладывается на отношение  $\eta$  тепловой длины волны де Бройля ядра  $\Lambda = h(2\pi mk_B T)^{-1/2}$  к радиусу объема, приходящегося на одно ядро  $R_0 = (3m/4\pi\rho)^{1/3}$ :

$$\eta = \frac{\Lambda}{R_0} = \left(\frac{2}{9\pi}\right)^{1/6} \frac{h\rho^{1/3}}{m^{5/6}(k_B T)^{1/2}} \ll 1.$$

Здесь  $\rho$  — плотность массы,  $m$  — масса ядра, а  $T$  — температура.

Электроны в веществе условно подразделяются на связанные и свободные. Последние также называют электронами проводимости. Связанные электроны локализируются вблизи ядер благодаря сильному электрон-ядерному взаимодействию, движутся вместе с ядрами и всегда проявляют квантовые свойства. При повышении температуры и увеличении плотности связанные электроны становятся свободными. Значение квантовых эффектов в газе, состоящем из свободных электронов, определяется отношением температуры ( $k_B T$ ) к энергии Ферми  $\varepsilon_F = (h^2/2m_e)(3n_e/8\pi)^{2/3}$ , где  $n_e$  — плотность электронов.

Конденсированная материя характеризуется неравенством  $k_B T \leq \varepsilon_F$ . При этом условия доминируют квантовые свойства свободных электронов. Теоретическое описание можно упростить при условии, что концентрация тепловой энергии не достигает значения, при котором связанные электроны могут перейти в возбужденное состояние или частично оторваться. При высоких температурах, когда  $k_B T \gg \varepsilon_F$ , свободные электроны ведут себя как классические частицы.

При снижении плотности и повышении температуры конденсированное вещество переходит в газоподобное состояние плавно или пересекает двухфазные области (рис. 2.1, 2.2). Для металлов (при нормальных условиях) условной границей между газообразным и жидким состоянием можно считать положение перехода от металла к диэлектрику. В состоянии плазмы существует область относительно слабого взаимодействия, которая характеризуется малыми значениями параметра неидеальности  $\Gamma = Ze^2/4\pi\epsilon_0 R_0 k_B T$ , представляющего собой отношение средних значений потенциальной и кинетической энергии.

Границу между плазмой и газом на плоскости плотность-температура можно определить, задавая степень ионизации атомов некоторым малым значением. Газовая фаза вещества (гл. 2) соответствует системе нейтральных слабо взаимодействующих классических частиц.

Авторы многих работ пренебрегают влиянием температуры и рассматривают такую систему как сильно вырожденную, формально принимая  $T = 0$  [13–15]. Эти авторы вычисляют уравнение состояния холодного вещества (например, гелия) при высоком давлении и подробно исследуют переход в металлическое состояние.

Наименее удобна для изучения область плотной плазмы при промежуточных температурах. Наиболее общий метод, который можно применить в этой области, — это рассмотреть движение ядер на основе классической

механики. При этом рассматривается модель, которая представляет такую плазму как совокупность электрически нейтральных слабо взаимодействующих ячеек объемом  $V_0$ . Область адекватной применимости этой модели, строго говоря, неизвестна, но границы ее физической несостоятельности можно определить с помощью концепции электронного радиуса дебаевского экранирования  $r_D = (\epsilon_0 k_B T / e^2 n_e)^{1/2}$ . Если свободные электроны не в состоянии экранировать ион в ячейке объемом  $V_0$ , то физического основания для использования такой ячейечной модели не существует. В газе, состоящем из вырожденных электронов, длина экранирования определяется как  $r_{TF} = (\pi / 3n_e)^{1/6} (h^2 \epsilon / 4\pi m_e e^2)^{1/2}$  и может использоваться для определения предела применимости ячейечной модели в этом случае.

Остановимся теперь на ячейечном приближении Вигнера–Зейтца, использованном нами в гл. 3, 6. Каждая ячейка содержит ядро с зарядом  $Z$  и соответствующее число электронов, что обеспечивает электрическую нейтральность [16, 17]. Движение электронов в поле ядра внутри данной ячейки описывается с помощью выбранной физической модели. Влияние электронов и ядер соседних ячеек учитывается через граничные условия. Обычно вклады ядер и электронов описываются независимо друг от друга в соответствии с адиабатическим приближением. На практике реальная ячейка Вигнера–Зейтца, имеющая сложную геометрическую форму, обычно заменяется сферической ячейкой объемом  $V_0$ .

Скажем теперь несколько слов о физических моделях, описывающих электронную подсистему. Одним из стандартных подходов является метод функций Грина [18]. Другой широко распространенный подход представлен теорией Сингви–Този–Лэнда–Золандера [12, 19].

К наиболее последовательным и эффективным методам следует отнести теорию функционала плотности (DFT), (см. гл. 7). Данный метод основан на теореме, которая гласит, что свободную энергию электронной системы во внешнем поле можно выразить как функционал электронной плотности. Этот функционал обычно неизвестен, и использование какого-нибудь из приближений порождает так называемые квантово-статистические модели или квантово-механические модели типа Хартри (см. п. 6.1). Использование подхода DFT оказалось, как мы увидим в гл. 7, очень успешным в физике конденсированного состояния.

Среди статистических моделей первой была модель Томаса–Ферми (гл. 7), в которой плотность электронов вычисляется в квазиклассическом приближении с использованием самосогласованного потенциала [20]. Когда были приняты во внимание регулярные и осцилляционные поправки, теоретические результаты приблизились к экспериментальным, и в термодинамическую модель были включены оболочечные эффекты.

Область применимости моделей Томаса–Ферми, определенная путем сравнения с результатами динамических экспериментов [21], и для конденсированных плотностей, соответствует давлениям  $p \geq 10^2$  ГПа.

Еще более последовательное описание связанных состояний в плазме реализуется с помощью квантово-механических моделей самосогласованного поля, в которых волновые функции электронов являются решениями уравнения Шредингера с граничными условиями модели. Последние представляют собой

трансляционную симметрию кристаллической решетки или приближенное описание этой симметрии (см. гл. 3) В первых формулировках квантово-механических моделей использовались приближения Томаса–Ферми в сочетании с электростатической теорией.

Модель Хартри–Фока (гл. 3, п. 6.1), которая учитывает обменное взаимодействие электронов, является самой полной одноэлектронной моделью, но при этом и самой сложной. Более простое описание обменных эффектов достигается в приближении Хартри–Фока–Слэтера, использующего так называемый локальный эффективный обменный потенциал. В конкретных вычислениях, основанных на модели Хартри–Фока–Слэтера [22], применялось квазиклассическое приближение для сильно возбужденных состояний связанных электронов и для свободных электронов. Другой исследователь [23] предложил очень простые граничные условия, позволяющие смоделировать верхнюю и нижнюю границы энергетических зон электронов. Синько [24] замкнул эту модель приближением для плотности состояний, имеющей форму характерную для свободных электронов, и предложил так называемую модель самосогласованного поля.

Как мы уже говорили, адиабатическое приближение позволяет отдельно вычислить, какой вклад в различные термодинамические функции вносят электроны, а какой — ядра. В ранних работах ядра рассматривались как идеальный газ. Была разработана модель точечных ионов, находящихся в среде с равномерно распределенным отрицательным зарядом, в которой учитывается неидеальность движения ядер [25, 26].

Общий недостаток вышеописанных ячеечных моделей, заключается в невозможности учесть межчастичные корреляции на расстояниях, превышающих размеры единичной ячейки. Ячеечные модели не способны описать типичные состояния плазмы, характеризующиеся дальнедействующими корреляциями, когда сфера Дебая содержит большое количество частиц. Модель ограниченного атома объединяет идеи как твердого состояния, так и плазмы; еще более простым подходом является «химическая модель» плазмы, описанная ниже.

### 4.3. Химическая модель. Безразмерные параметры

Следуя работе [5] рассмотрим плазму, состоящую из свободных электронов с плотностью числа частиц  $n_e$  и ядер или ионов с плотностью числа частиц  $n_z$  с положительными зарядами  $ze$  ( $z = 1, \dots, Z$ ).

Будем считать движение частиц нерелятивистским, когда параметр Солпитера

$$\chi_r \equiv \frac{p_F}{m_e c} \sim \left( \frac{\rho_6 \langle Z \rangle}{A'} \right)^{1/3} \ll 1,$$

$p_F = \hbar k_F = \hbar(3\pi^2 n_e)$ ,  $\rho_6 = \frac{\rho}{10^6}$  г/см<sup>3</sup>. Противоположный этому случай — релятивистский — мы рассмотрим в конце этого параграфа.

Мы определяем общую плотность положительных зарядов  $n_+$  и средний заряд выражениями

$$n_+ = \sum_{i=1}^Z n_i, \quad (4.1)$$

$$\langle z^p \rangle = n_+^{-1} \sum_{i=1}^Z z_i^p n_i. \quad (4.2)$$

Вводя среднее расстояние между электронами

$$d_e = \left( \frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3}, \quad (4.3)$$

и между положительными зарядами,

$$d_+ = \left( \frac{3}{4\pi n_+} \right)^{1/3}, \quad (4.4)$$

мы определяем два безразмерных параметра корреляции:

$$\Gamma_e = \frac{\varepsilon^2}{\theta_e d_e}, \quad (4.5)$$

$$\Gamma_+ = \frac{\varepsilon^2}{\theta_+ d_+} \langle z^{5/3} \rangle \langle z \rangle^{1/3}. \quad (4.6)$$

Здесь  $\theta_e$  и  $\theta_+$  — усредненные кинетические энергии, включающие вырождение. В классическом случае они имеют вид

$$\theta_e = \theta_+ = k_B T. \quad (4.7)$$

В квантовом же случае они определяются в соответствии с формулой

$$\theta_k = \frac{p^{\text{id}}}{n_k}, \quad (4.8)$$

где  $p^{\text{id}}$  — давление идеального газа Ферми. Другими словами,

$$\theta_k = \frac{2k_B T}{n_k \Lambda_k^3} I_{3/2}(\alpha_k), \quad (4.9)$$

$\alpha_k$  — безразмерный химический потенциал,  $I_{3/2}(x)$  — интеграл Ферми порядка 3/2, а  $\Lambda_k$  — тепловая длина волны де Бройля. Границу между классической и квантовой областью можно установить с помощью безразмерного параметра вырождения

$$\zeta = n_k \Lambda_k^3, \quad (4.10)$$

задающего отношение среднего расстояния между частицами, пропорционального  $n_k^{-1/3}$ , и типичной квантовой длины волны де Бройля,  $\Lambda_k$ .

Далее мы определяем параметр, описывающий интенсивность электронного взаимодействия:

$$\xi_e = 2 \langle z \rangle (I/\theta_e)^{1/2}, \quad (4.11)$$

где  $I$  — энергия ионизации водорода. Затем мы вводим тепловую длину волны де Бройля для относительного движения ионов и электронов:

$$\lambda_{ii} = \frac{\hbar}{(m_i k_B T)^{1/2}}, \quad \lambda_{ee} = \frac{\hbar}{(m_e k_B T)^{1/2}}, \quad \lambda_{ie} = \frac{\hbar}{(2m_{ie} k_B T)^{1/2}}, \quad (4.12)$$

где  $m_{ie}$  — приведенная масса для электрон-ионной пары.

Используя длину Ландау  $\ell$ ,

$$\ell = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}, \quad (4.13)$$

мы можем определить параметры взаимодействия

$$\xi_{ee} = \frac{\ell}{\lambda_{ee}}, \quad \xi_{ii} = \frac{z^2 \ell}{\lambda_{ii}}, \quad \xi_{ie} = \frac{z \ell}{\lambda_{ei}}. \quad (4.14)$$

На рисунках 4.1 и 4.2 приведен график зависимости плотности от температуры для однозарядной плазмы ( $Z = 1$ ). Рисунок 4.1 соответствует случаю масс-симметричной плазмы (электрон-позитронной плазмы, электрон-дырочной плазмы и т. п.), а рис. 4.2 — случаю масс-несимметричной плазмы (например, газовой плазмы). Внутри линии  $\xi_e = 1$  наблюдаются сильные взаимодействия, а внутри линии  $\xi_e = 10$  — очень сильные взаимодействия. Это проявится, например, в эффектах рассеяния и связанных состояний. На рис. 4.1 присутствуют кривые  $\Gamma_e = 1$  и  $\xi_e = 1$ , разделяющие области сильных и слабых корреляций и электронных взаимодействий соответственно. Физический смысл выражения  $\Gamma_k \geq 1$  состоит в том, что потенциальная энергия больше средней кинетической энергии, а выражения  $\xi_k \geq 1$  — в том, что взаимодействия существенны для процессов микроскопического рассеяния, т. е. теория возмущений (боровское приближение) нарушается. Интересно отметить, что как область взаимодействия, так и область неидеальности ограничиваются левым нижним углом плоскости  $n$ - $T$ . В этом отношении

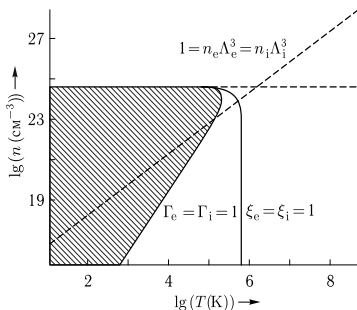


Рис. 4.1. Область неидеальности на графике зависимости плотности от температуры для симметричной плазмы (например, электрон-позитронной плазмы)

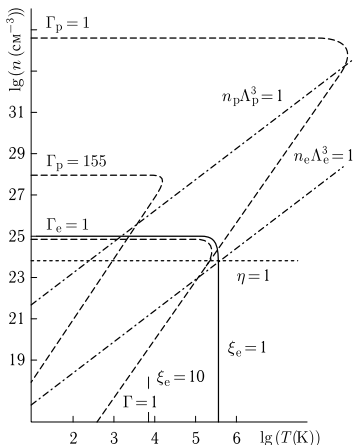


Рис. 4.2. Области параметров электрон-протонной плазмы. Штрих пунктирные линии соответствуют границе вырождения электронов и протонов, соответственно. Пунктирная линия соответствует переходу вследствие блокировки Паули

ет промежуточная область,

$$\Lambda_e^{-3} < n < \Lambda_p^{-3}, \quad (4.15)$$

где протоны ведут себя по законам классической физики, а электроны образуют вырожденный квантовый газ. В данной области можно ожидать образования ионной решетки или, в конечном счете, молекулярной решетки.

Для примера рассмотрим Солнце. Типичные параметры Солнца:

$$\Gamma_+ < 0,1; \quad 0,01 < \xi < 100. \quad (4.16)$$

Это свидетельствует о том, что материя Солнца пребывает в условиях слабой неидеальности, но сильных двухчастичных взаимодействий.

Другим важным параметром является относительная занятость имеющегося пространства связанными состояниями:

$$\eta = \frac{4\pi}{3} \sum_b n_b R_b^3, \quad (4.17)$$

где  $n_b$  и  $R_b$  — плотность и эффективный радиус связанного состояния  $b$ . В области  $\eta > 1$ , изображенной на рис. 4.2, связанные состояния, требующие относительно большого пространства, разрушаются из-за эффектов блокиров-

высокая плотность и высокие температуры имеют тот же качественный эффект: взаимодействия и неидеальность играют меньшую роль, и поведением управляет только кинетическая энергия. Причиной этого эффекта, конечно же, служит сильное увеличение кинетической энергии ферми-газа при высоких температурах и/или высоких плотностях.

Влияние квантовых эффектов сильно зависит от масс частиц. Следовательно, плоскость  $n$ - $T$  для масс-симметричных систем (рис. 4.1) имеет гораздо более простую структуру, чем та же плоскость для масс-несимметричной плазмы (рис. 4.2). Из рисунка 4.2 мы видим, что поведение электронов и ионов при высокой плотности существенно различается вследствие разных значений массы  $m_p \gg m_e$ . Более легкие электроны достигают вырождения при более низких плотностях. Следовательно, существу-

ки Паули, которые делают существование связанных состояний термодинамически невыгодным.

Термин «блокировка Паули» используется здесь и далее для обозначения специфического класса эффектов, связанных с принципом запрета Паули [18, 27]. Из свойств волновой функции по отношению к перестановкам электронов следует, что каждое состояние может занимать только один электрон. Более того, именно этим объясняется, почему свободные электроны не могут проникнуть во внутреннюю часть атомов. Несмотря на то, что, по крайней мере, в картине Бора внутренняя часть атомов почти пуста, электроны и другие частицы, содержащие электроны, не могут проникнуть в атомы. В этом и состоит сущность эффектов блокировки Паули, играющих важную роль в горячей плотной плазме.

Особенно важную роль в развитии теории теплофизических свойств сыграли вычисления Монте–Карло для однокомпонентной плазмы (см. гл. 5). Начало этому очень плодотворному направлению положили новаторские исследования Браша, Салина и Теллера (1966), которые продолжили Хансен (1972, 1973), Де Витт (1976), а также Замалин, Норман и Филинов (1977) и др.

Наиболее исследованной, хотя и максимально упрощенной, моделью кулоновских систем является модель однокомпонентной плазмы, расположенной для обеспечения ее устойчивости на однородном фоне компенсирующего заряда противоположного знака. В такой плазме отсутствует рекомбинация, а вид потенциала взаимодействия не вызывает сомнений.

В этой модели отсутствуют нейтралы, а размером иона  $r_1 \sim a_B/Z^{1/3}$  ( $a_B$  — боровский радиус), можно пренебречь по сравнению со средним межчастичным расстоянием.

Данная модель плазмы является объектом исследований в рамках многочисленных асимптотических теорий [28–30], основанных на разложении по малым параметрам, перегруппировке и выборочном суммировании рядов теории возмущений, а также приближений, использующих заимствованную из теории жидкости технику интегральных уравнений [31]. Эталонном здесь служат расчеты методом Монте–Карло [32–35], основанные на прямом машинном вычислении конфигурационного интеграла, что позволяет получить исчерпывающую информацию о классической однокомпонентной плазме в чрезвычайно широком диапазоне параметров:  $\Gamma = 0,05 \div 300$  ( $\Gamma = e^2/k_B T r_{ws}$ ), где среднее межчастичное расстояние  $r_{ws} = (3/4\pi n)^{1/3}$ , т. е.  $\Gamma = (\Gamma_D^2/3)^{1/3}$ ), и дает возможность построить простые аппроксимационные выражения [34, 35]. В работе [36] при расчетах методом Монте–Карло была учтена экранировка зарядов фона путем вычисления его диэлектрической проницаемости в приближении линейного отклика. Развитые на основе вариационного принципа аналитические методы [37, 38] используют для описания ионного фона теорию возмущений, причем в качестве нулевого приближения берутся расчеты по модели твердых сфер. Результаты такого подхода оказываются близкими к расчетам Монте–Карло, особенно при больших значениях  $\Gamma$  (рис. 4.3). Следует отметить, что сами расчеты свойств однокомпонентной плазмы используются в ряде случаев в качестве более реалистического, чем по модели

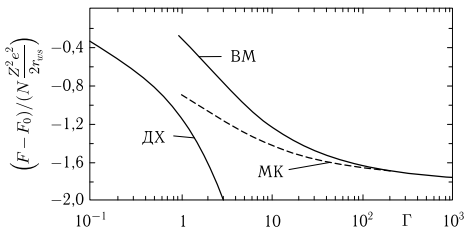


Рис. 4.3. Свободная энергия однокомпонентной плазмы [37, 38]. МН — расчеты по методу Монте-Карло, ВМ — вариационный метод (верхняя граница), ДХ — закон Дебая-Хюккеля (нижняя граница)

твердых сфер, нулевого приближения при определении термодинамических характеристик жидких металлов (см. гл. 2).

Экстраполяционные качества различных асимптотических приближений можно радикально улучшить [39] (рис. 4.4), если дополнительно наложить на расчетную корреляционную функцию условие локальной электронной нейтральности, соответствующее равенству заряда поляризационного плазменного облака заряду частицы, создающей это облако в плазме. Данное и аналогичные ему условия, наложенные на экранирование дипольного и квадрупольного моментов [39] не зависят от силы взаимодействия в системе и следуют из фундаментального факта существования термодинамического предела кулоновских систем [40]; их учет позволяет эффективно исправлять приближенные корреляционные функции, найденные на основе модельных соображений или построенные путем разложений по малым параметрам. Отметим, что решение для однокомпонентной плазмы уравнений свёрхпереплетающихся

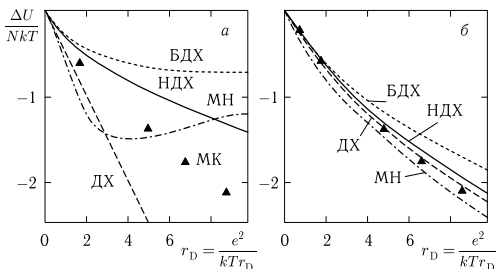


Рис. 4.4. Энергия взаимодействия однокомпонентной плазмы без учета (а) и с учетом (б) условия локальной электронной нейтральности [39]. МК — расчеты по методу Монте-Карло, ДХ — закон Дебая-Хюккеля, НДХ — нелинеаризованный ДХ, БДХ — ДХ в большом каноническом ансамбле, МН — с учетом зависимости радиуса экранирования от  $\Gamma_D$

цепей [31], в которых автоматически выполняются необходимые условия полноты корреляционной функции и локальной электронейтральности, дает близкие к расчетам Монте–Карло результаты.

Выполненные в работе [32–35] численные расчеты свойств однокомпонентной классической плазмы свидетельствуют о появлении при значительных сжатиях термодинамических аномалий и ближнего порядка, что интерпретируется как кристаллизация [41]. Согласно последним результатам [34, 35], учитывающим зависимость энергий жидкой и твердой фаз от числа используемых в методе Монте–Карло пробных частиц, в пределе  $N \rightarrow \infty$  этот переход соответствует величине  $\Gamma = e^2 n^{1/3} / kT = 178 \pm 1$ .

В реальной плазме с ростом плотности происходит вырождение, и для описания взаимодействия в этом случае обычно пользуются безразмерным параметром  $r_s = r_{WS} / a_0$  ( $a_0 = \hbar / me^2$  — боровский радиус), характеризующим отношение среднего межчастичного расстояния к атомному. Этот параметр мал в сильносжатой плазме, что позволяет применить теорию возмущений и вычислить несколько первых членов разложения по константе связи [28, 42, 43]. Вигнер сформулировал [44] кристаллическую модель разреженной вырожденной ( $r_s \gg 1$ ) плазмы, предположив, что электронная компонента в результате сильного кулоновского взаимодействия переходит в гранцентрированную кубическую решетку. Свойства такого кристалла и условия его плавления подробно исследовались [45] с учетом нулевых и тепловых колебаний, ангармонизма и обменных эффектов.

Характеристики квантовой электронной плазмы определялись также методами Монте–Карло [46, 47], причем расчеты показали переход от неполяризованной к ферромагнитной жидкости при  $r_s > 26$  и вигнеровскую кристаллизацию при  $r_s > 67$ <sup>1)</sup>. Соображения о завышенности этой оценки приведены в [48], где рассмотрены эффекты локального поля и на языке диэлектрической проницаемости проанализирована устойчивость вырожденной электронной жидкости относительно распространения волн зарядовой и спиновой плотности. Подробно особенности фазовых переходов в кулоновских системах рассмотрены в обзоре [49], где отмечено то обстоятельство, что сами условия существования кристалла Вигнера соответствуют области термодинамической неустойчивости относительно перехода газ–жидкость. Отметим в этой связи, что в настоящее время нет экспериментальных наблюдений вигнеровской кристаллизации в кулоновских системах, а сообщения об экспериментальном обнаружении кристалла Вигнера в опытах с использованием конденсированных взрывчатых веществ [50] оказались, как показали более детальные исследования [51], ошибочными.

К вопросу о переменных фазовых переходах еще вернемся в гл. 8.

В целом модель однокомпонентной плазмы является эффективной для расчета свойств электронного газа в простых металлах, где основной вклад в энергию системы дает прямое кулоновское отталкивание между ионами и их косвенное притяжение через электроны проводимости [52]. Эта модель

<sup>1)</sup> Зависимости энергии основного состояния различных фаз от  $r_s$  очень близки, что приводит к высокой чувствительности положения точек переходов к малейшим неточностям в уравнениях состояния конкурирующих фаз [45–47].

в определенных условиях описывает также термодинамику плазмы металлоаммиачных растворов, сильно легированных полупроводников, водородно-гелиевой плазмы Юпитера и Сатурна и ядерной жидкости в плотных и сверхплотных звездах.

Основной недостаток однокомпонентной модели плазмы состоит в предельно упрощенном учете заряда противоположного знака, составляющего бесструктурный компенсирующий фон. Более адекватные модели плазмы предполагают явный учет структуры и взаимодействия зарядов всех знаков с обязательным описанием квантовых эффектов при кулоновском взаимодействии, приводящем к сходимости координатной части гиббсовской вероятности при сближении разноименных зарядов, что в конечном счете и обеспечивает стабильность системы. Известны многочисленные попытки [3] сохранить классический формализм введением обрезания кулоновского потенциала на малых расстояниях с принудительным исключением конфигураций со сближившимися зарядами. При этом в окончательный ответ входит параметр обрезания и, кроме того, многие модели при  $\Gamma_D \gtrsim 1$ , когда радиус обрезания становится сравнимым с межчастичным расстоянием, теряют термодинамическую устойчивость.

#### 4.4. Физическая модель. Термодинамические соотношения

Последовательное квантовомеханическое рассмотрение задачи исходит из гамильтониана, содержащего полное взаимодействие между всеми зарядами. Это соответствует физической модели многокомпонентной плазмы, в которой вклад дискретного спектра оказывается конечным и возникает одновременно с вкладом непрерывного спектра свободных зарядов [4]. Физическая модель является наиболее общей и последовательной для реальной плазмы, однако практические вычисления в рамках этой модели весьма трудоемки и не получили пока достаточного распространения [53, 54], так как ее применение к плазме многоэлектронных элементов предполагает как составную часть квантовомеханическое вычисление внутренней структуры связанных состояний.

Физическая модель является более последовательной, но более сложной для вычисления термодинамических функций плазмы [18]. Для сложных систем и, в частности, для плазмы, содержащей атомы нескольких химических элементов, трудности, связанные с реализацией физической модели, многократно возрастают, поэтому в практике расчетов обычно применяется более простая химическая модель. Как хорошо известно, эта модель заранее предполагает наличие частиц определенных сортов, имеющих непрерывный спектр энергий, а влияние внутренней структуры частиц (связанных состояний) учитывается введением индивидуальных статсумм. Это является источником известных трудностей, связанных с условностью разделения всех степеней свободы на поступательные и внутренние, в каждой конкретной модели эти трудности можно обойти, исходя из тех или иных физических соображений [18]. Существует множество литературных источников, посвященных описанию физических аспектов применения химической модели для расчета термодинамических функций и соответствующие математические процедуры, необходимые для изучения неидеальной многокомпонентной плазмы.

В разреженной плазме конфигурации со сближившимися частицами маловероятны, что позволяет ввести модельные упрощения. Главное из них состоит в раздельном описании состояний дискретного и непрерывного спектров, соответственно определяющих внутреннюю структуру атомов и ионов и характер поведения свободных частиц. Такое приближение составляет основу наиболее популярной в физике плазмы модели, называемой химической, так как количество частиц разного сорта  $N_j$  определяется в этом случае условиями химического равновесия [5, 55] (4.20), а все гипотезы относительно структуры частиц и их взаимодействия содержатся в выражении для свободной энергии (4.18):

$$F(V, T, \{N_j\}) = F_k + F_d + F_c + F_i.$$

Вклад дискретного спектра  $F_d$  в этой модели оказывается выделенным и рассчитывается независимо от вклада непрерывного спектра, представленного кинетической частью  $F_k$ ; разнообразные поправки на межчастичное взаимодействие описываются членом  $F_c$ . Если излучение находится в локальном термодинамическом равновесии с веществом, то необходимо учитывать также вклад энергии фотонного газа, который становится существенным при экстремально высоких разогревах вещества или его сильном разрежении:  $F_d = -(4\sigma/3c)VT^4$ .

Сделанные выше предварительные замечания относительно существующих методов расчета химического и ионизационного равновесия позволяют проанализировать проблемы, возникающие при разработке вычислительных методов термодинамики неидеальной плазмы. В значительной мере они связаны с необходимостью вычислять параметры уравнения состояния и термодинамические функции вещества в широком диапазоне температур и плотностей. Такие актуальные физические задачи, как исследование процессов сжатия вещества ударными волнами, взаимодействие с веществом мощных потоков излучения, требуют адекватного описания термодинамики неидеальной плазмы, начиная от области конденсированного состояния вплоть до экстремально высоких температур и давлений, соответствующих полностью ионизованной сильносжатой плазме. При изменении температур и давлений в столь широких пределах состав плазмы существенно изменяется. Поэтому предполагаемый метод расчета должен с одной стороны предусматривать образование многоатомных молекул и молекулярных комплексов, а с другой — учитывать процессы диссоциации и ионизации любой кратности. Кроме того, при высоких плотностях в зависимости от температуры могут проявляться самые разнообразные механизмы взаимодействия между частицами, определяющие термодинамические свойства системы, включая кулоновское взаимодействие между заряженными частицами, взаимодействие нейтральных частиц между собой и заряженных частиц с нейтральными, а при экстремально высоких температурах и плотностях — короткодействующее отталкивание ионов, вследствие перекрывания электронных оболочек.

При этом сильное межчастичное взаимодействие сказывается, и на структуре связанных состояний, что выражается в зависимости статистических сумм частиц от плотности, а не только от температуры. Это ограничивает применимость обычных методов термодинамического расчета многокомпо-

нентных систем [56, 57], основанных на использовании термодинамических функций индивидуальных веществ [58], областью низких плотностей, где этим эффектом можно пренебречь. Необходимо также учитывать, что адекватное описание вещества при изменении термодинамических параметров в широких пределах может осуществляться разными моделями, начиная от приближения идеального газа и до модели вырожденного электронного газа с сильным кулоновским взаимодействием ионов. В силу того, что область применимости каждой из моделей ограничена, метод расчета должен обладать достаточной универсальностью для того, чтобы использование различных моделей неидеальности не приводило к существенному изменению математической процедуры.

Итак, сформулируем кратко требования к методу расчета термодинамических свойств неидеальной многокомпонентной плазмы.

1. Возможность включать в расчет частицы любых сортов от сложных многоатомных комплексов до ионов произвольной кратности.

2. Универсальность по отношению к моделям плазменной неидеальности, учитывающим как взаимодействие свободных частиц, так и влияние этого взаимодействия на структуру энергетического спектра связанных состояний.

Как известно в состоянии термодинамического равновесия свободная энергия системы достигает минимума [55]. Отсюда можно получить уравнения, называемые обычно уравнениями равновесия, связывающие между собой числа частиц различных сортов. Для этого рассмотрим систему частиц  $L$  сортов при температуре  $T$ , заключенную в объем  $V$  и содержащую  $K - 1$  химических элементов и электроны. При этом электроны можно рассматривать как отдельный химический элемент. Согласно химической модели вещества ядра и электроны могут образовывать составные частицы различных сортов — атомы, ионы, молекулы и т.д., так что каждый сорт характеризуется соответствующим числом частиц  $N_j$ . Тогда свободная энергия системы может быть записана в виде

$$F(\{N_i\}, V, T) = \sum_{j=1}^L N_j k_B T \left( \ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} - 1 \right) + \Delta F_{\text{int}}(\{N_i\}, V, T). \quad (4.18)$$

где  $n_j = N_j/V$  — плотность (концентрация) числа частиц сорта  $j$ ,  $\Lambda_j$  — тепловая длина волны де Бройля,  $\sigma_j$  — внутренняя статистическая сумма, в которой нуль энергии соответствует состоянию полного распада частицы на ядра и электроны;  $\Delta F_{\text{int}}$  — поправка к идеальной бальцмановской части свободной энергии, вызванная взаимодействием частиц между собой и вырождением. Так как система не обменивается частицами с окружающей средой, число ядер каждого из  $K$  химических элементов, а также число электронов, остаются неизменными, следовательно

$$\sum_{i=1}^L \nu_k^i N_i = \tilde{N}_k; \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (4.19)$$

где  $\tilde{N}_k$  — полное число ядер сорта  $k$  в системе,  $\nu_k^i$  — число ядер сорта  $k$  в частице  $i$ -го сорта.

Условие экстремума свободной энергии системы, заключенной в объем  $V$  при температуре  $T$ , при постоянных  $\tilde{N}_k$ , выражается следующим образом:

$$\sum_{j=1}^L \left( \frac{\partial F}{\partial N_j} \right)_{V,T,\{N_i\}} \delta N_j = 0. \quad (4.20)$$

Из (4.19) ясно, что дифференциалы  $N_j$  связаны соотношениями

$$\sum_{j=1}^L \nu_k^j \delta N_j = 0, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (4.21)$$

Если условиться номерами сортов смеси с 1 до  $K$  обозначать голые ядра, тогда из (4.21) очевидно следует, что

$$\delta \tilde{N}_k = \sum_{i=K+1}^L \nu_k^i \delta N_i, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (4.22)$$

Подставляя (4.22) в (4.20) и имея в виду, что химический потенциал определяется выражением

$$\mu_i = \left( \frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{V,T,\{N_j\}}, \quad (4.23)$$

получим соотношение

$$\sum_{i=K+1}^L \left( \mu_i - \sum_{k=1}^K \nu_k^i \mu_k \right) \delta N_i = 0, \quad (4.24)$$

где дифференциалы  $\delta N_i$  являются независимыми. Следовательно, из (4.24) будем иметь  $L - K$  соотношений

$$\mu_j = \sum_{k=1}^K \nu_k^j \mu_k, \quad j = K + 1, \dots, L. \quad (4.25)$$

Очевидно, каждое из соотношений (4.25) соответствует химической реакции вида

$$A_{\nu 1}^1 A_{\nu 2}^2 \dots A_{\nu M}^K \Leftrightarrow \nu_1 A^1 + \nu_2 A^2 + \dots + \nu_k A^k, \quad (4.26)$$

которая представляет собой распад комплексной частицы  $A_{\nu 1}^1 A_{\nu 2}^2, \dots, A_{\nu M}^K$  на ядра и электроны. Из формулы (4.18) для свободной энергии следует, что химический потенциал имеет следующий вид:

$$\mu_j = \ln \left( \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \Delta \mu_j^{\text{int}}(\{n_i\}, T), \quad j = 1, 2, \dots, L. \quad (4.27)$$

Тогда уравнения (4.25) принимают вид обычных уравнений химического и ионизационного равновесия,

$$\ln n_j - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \ln n_k = \ln K_n^j(\{n_i\}, T), \quad (4.28)$$

аналогом которых для идеального газа является закон действующих масс, а для идеальной плазмы — уравнения Саха [55]. Правая часть в (4.28) представляет собой константу равновесия химической реакции (4.26), которая может быть записана в следующей форме:

$$\ln K_n^j(\{n_j\}, T) = \ln \frac{\tilde{\sigma}_j}{\Lambda_j^3} + I_j - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[ \ln \frac{\tilde{\sigma}_k}{\Lambda_k^3} + I_k \right] - \left( \Delta \mu_j^{\text{int}}(\{n_i\}, T) - \sum_{k=1}^K \nu_k^j \Delta \mu_k^{\text{int}}(\{n_i\}, T) \right), \quad (4.29)$$

где  $\Delta \mu_j^{\text{int}}(\{n_i\}, T)$  — поправка к идеальной части химического потенциала, ответственная за взаимодействие частиц между собой,  $I_j$  — энергия, необходимая для распада  $j$ -й частицы на ядра и электроны, а выражение в круглых скобках представляет собой изменение энергии связи электронов и ядер в комплексной (составной) частице за счет межчастичного взаимодействия, которое в случае ионизации соответствует «снижению потенциала ионизации» в плазме. Здесь статистическая сумма

$$\tilde{\sigma}(\{n_j\}, T) = \sum_i \omega_i(\{n_j\}, T) g_i e^{-E_i/k_B T} \quad (4.30)$$

вычисляется по всем уровням энергии внутренних степеней свободы частицы, отсчитанным от энергии ее основного состояния, множитель  $\omega_i$ , вообще говоря, зависит как от температуры, так и от плотности и определяется принятой в расчете моделью неидеальности. Для определения статистической суммы  $\tilde{\sigma}(\{n_j\}, T)$  (4.30) надо произвести суммирование по числу связанных уровней, которое, вообще говоря, бесконечно [59, 60], что приводит к расходимости  $\tilde{\sigma}(\{n_j\}, T)$  по связанным состояниям самой суммы. Для устранения этой расходимости было предложено большое количество ограничений  $\tilde{\sigma}$  [61], основанных на различных физических соображениях.

Обычно в термодинамических расчетах началом отсчета энергии служит состояние системы, в котором все вещество находится в виде атомов на низшем энергетическом уровне. Поэтому вместо  $I_j$  удобно ввести величины  $A_j$ , равные разности между энергией частицы и энергией атомов, составляющих частицу, разведенных на бесконечное расстояние. Например, для однократно заряженного иона величина  $A_j$  равна потенциалу ионизации, а для молекулы — энергии диссоциации с противоположным знаком и т. д. В дальнейшем мы для простоты будем опускать волну над знаком статсуммы, имея в то же время ввиду, что энергии частиц отсчитываются от их основных состояний. Тогда уравнения химического и ионизационного равновесия (4.28) можно записать в виде

$$\ln \left( \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \frac{A_j}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_j^{\text{int}}}{k_B T} = \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[ \ln \left( \frac{n_k \Lambda_k^3}{\sigma_k} \right) + \frac{A_k}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_k^{\text{int}}}{k_B T} \right]; \quad (4.31)$$

$$j = K + 1, \dots, L.$$

Если система находится при фиксированном давлении  $p_0$  и температуре  $T$ , то уравнения (4.31) должны быть дополнены уравнением состояния:

$$\sum_{j=1}^L n_j k_B T + \Delta p^{\text{int}}(\{n_i\}, T) = p_0, \quad (4.32)$$

где  $\Delta p$  — поправка к идеальной части давления, соответствующая поправке на неидеальность  $\Delta F$  в свободной энергии. При рассмотрении системы с заданными плотностью  $\rho_0$  и температурой вместо уравнения состояния необходимо привлечь уравнение для плотности:

$$\sum_{j=1}^L m_j n_j = \rho_0, \quad (4.33)$$

где  $m_j$  — масса  $j$ -й частицы. В практических расчетах вместо соотношений (4.19) задаются отношением числа ядер данного химического элемента к полному числу ядер химических элементов, входящих в смесь:

$$\beta_k = \frac{\tilde{N}_k}{\sum_{i=2}^K \tilde{N}_i}.$$

Если индексом 1 обозначить электроны, тогда эти отношения можно выразить в виде

$$\beta_k(\{n_j\}) \equiv \frac{\sum_{j=1}^L \nu_k^j n_j}{\sum_{i=2}^K \sum_{j=1}^L \nu_i^j n_j}; \quad k = 2, \dots, K, \quad (4.34)$$

и, соответственно, уравнения пропорций будут иметь вид

$$\beta_k(\{n_j\}) = b_k; \quad k = 2, \dots, K. \quad (4.35)$$

Плазма в равновесии должна удовлетворять условию электронейтральности:

$$\sum_{j=1}^L z_j^{(+)} n_j = \sum_{j=1}^L z_j^{(-)} n_j, \quad (4.36)$$

где  $z_j^{(+)}$  и  $z_j^{(-)}$  — заряды положительно и отрицательно заряженных ионов. С учетом данного условия можно обобщить уравнения (4.35), включив в материальный баланс и электроны в качестве самостоятельного «химического элемента».

Вместо величин  $\beta_k$  в расчетах часто используются эквивалентные им величины  $\alpha_k$ :

$$\alpha_k(\{n_j\}) \equiv \frac{\sum_{j=1}^L \nu_k^j n_j}{\left[ \sum_{i=1}^K \left( \sum_{j=1}^L \nu_i^j n_j \right)^2 \right]^{1/2}}; \quad k = 1, \dots, K. \quad (4.37)$$

Этим величинам соответствуют уравнения

$$\alpha_k(\{n_j\}) = c_k; \quad k = 1, \dots, K, \quad (4.38)$$

которые мы будем использовать в дальнейшем.

Таким образом, мы получили полную систему уравнений, необходимую для определения состава термодинамически равновесной газовой системы, которая включает:

1) уравнение состояния,

$$\sum_{j=1}^L n_j k_B T + \Delta p^{\text{int}}(\{n_i\}, T) = p_0,$$

для системы с заданными  $p_0$  и  $T$  или уравнение для плотности,

$$\sum_{j=1}^L m_j n_j = \rho_0,$$

для фиксированных  $\rho_0$  и  $T$ ;

2) уравнения химического и ионизационного равновесия

$$\ln \left( \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} \right) + \frac{A_j}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_j^{\text{int}}}{k_B T} = \sum_{k=1}^K \nu_k^j \left[ \ln \left( \frac{n_k \Lambda_k^3}{\sigma_k} \right) + \frac{A_k}{k_B T} + \frac{\Delta \mu_k^{\text{int}}}{k_B T} \right],$$

$$j = K + 1, \dots, L;$$

3) уравнения пропорций химических элементов:

$$\alpha_k(\{n_j\}) = c_k; \quad k = 1, \dots, K.$$

Система (4.31)–(4.33), (4.38) представляет собой систему трансцендентных уравнений относительно  $n_j$  при заданных  $\{c_k\}$  и заданных  $p_0$  и  $T$  (или  $\rho_0$  и  $T$ ). В настоящее время существует два подхода к расчету состава многокомпонентных равновесных систем, которые лежат в основе множества конкретных реализаций. Первый из них основан на решении системы уравнений равновесия (4.31)–(4.33), (4.38), второй — на прямой минимизации соответствующего термодинамического потенциала. Не претендуя на общность, мы обсудим возможности каждого из этих методов для неидеальной плазмы и конкретные алгоритмы расчета.

Рассматривая применение подхода, основанного на решении уравнений равновесия, отметим особенности неидеальной плазмы, как объекта тер-

динамического расчета. Прежде всего заметим, что этот метод близок к методам [62], основанным на использовании закона действующих масс для идеальными газовых систем. Отличие в нашем случае заключается в появлении поправки на неидеальность в уравнении состояния и, что более существенно, в зависимости констант равновесия от плотности. Последнее обстоятельство, как уже упоминалось, делает невозможным использование заранее затабулированных констант равновесия (например, из [58]), поэтому возникает необходимость их вычисления в процессе решения системы уравнений равновесия. Для расчета констант в свою очередь необходимо вычислять статсуммы (4.33) либо по уровням энергии изолированных частиц со статистическими весами, зависящими от выбранной модели взаимодействия, либо по совокупности уровней, рассчитанных с учетом взаимодействия частиц в среде.

При расчете термодинамических свойств сильно сжатой неидеальной плазмы к методу расчета предъявляют следующие очевидные требования. С одной стороны, метод должен позволять формально получать решение при любых плотностях, а с другой — быть достаточно гибким, чтобы была возможность использования различных моделей неидеальности [5]. (Подробное описание используемых алгоритмов можно найти в работе [5]).

Изложенные методы лежат в основе программных модулей SANA-4 для расчета термодинамики многокомпонентной неидеальной плазмы, содержащей до 10 различных химических элементов и SANA-3 для расчета сильнонеидеальной одноэлементной плазмы. Наряду с расчетом равновесного состава и термодинамических функций для заданных  $p$  и  $T$ ,  $\rho$  и  $T$  комплекс программ для термодинамических расчетов SANA позволяет рассчитывать изобары, изохоры, изоэнтальпы, изоэнтропы, ударные адиабаты и другие термодинамические кривые, используя различные модели межчастичного взаимодействия.

#### 4.5. Термодинамика неидеальной плазмы Солнца

Особую проблему при расчете термодинамики плазмы представляет адекватный учет связанных состояний [55]. Стандартный подход состоит в расчете статистической суммы  $\bar{\sigma}(\{n_j\}, kT)$  по (4.30), которая, однако, расходится,  $\bar{\sigma}(\{n_j\}, kT) \rightarrow \infty$ , при учете бесконечного числа возбужденных состояний,  $j \rightarrow \infty$ . Это требует введения механизмов ограничения числа  $j$ , основанных на различных физических соображениях и поэтому содержащих элемент неопределенности. Следуя работе [64], мы приведем здесь свободный от этих недостатков метод, позволяющий непротиворечиво построить термодинамику низкотемпературной слабонеидеальной плазмы.

Впервые формула для равновесной степени ионизации в плазме, состоящей из нейтральных атомов, однозарядных ионов и свободных, несвязанных в атомы, электронов, была опубликована лектором по физике и прикладной математике Калькутского университета Мегнадом Саха в 1920 году [65] и подробнее изложена в итоговой работе [66], на которую в основном ссылаются при упоминании ставшей знаменитой формулы Саха. Эта формула позволяла определить степень ионизации в солнечной хромосфере для объяснения появления ионных линий различных элементов при увеличении удаления от солнечной поверхности и с ростом температуры плазмы. Она

была получена из закона действующих масс, известного для химических реакций и ее вывод вполне соответствовал выводу, изложенному в классической книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица «Статистическая физика» [55]. Коротко приведем этот вывод, придерживаясь обозначений, принятых в этой книге.

Обозначим долю нейтральных атомов как

$$c_0 = \frac{n_a}{n_a + n_i + n_e}, \quad (4.39)$$

где  $n_k$  — концентрация частиц сорта  $k$ ,  $k = a, i, e$ ; доля однозарядных ионов

$$c_1 = \frac{n_i}{n_a + n_i + n_e}, \quad (4.40)$$

доля электронов

$$c = \frac{n_e}{n_a + n_i + n_e}. \quad (4.41)$$

Выполняется также условие электронейтральности:

$$n_e = n_i, \quad c_1 = c. \quad (4.42)$$

Введем степень ионизации  $\alpha$ , равную

$$\alpha = \frac{n_e}{n_a + n_i} = \frac{n_e}{n}, \quad (4.43)$$

где  $n = n_a + n_i$  — концентрация тяжелых частиц. Величины  $c_0$ ,  $c_1$  и  $\alpha$  связаны соотношениями

$$c_1 = \frac{\alpha}{1 + \alpha}, \quad c_0 = \frac{1 - \alpha}{1 + \alpha}. \quad (4.44)$$

Закон равновесия для реакций ионизации,  $e + A \rightleftharpoons A^+ + e + e'$  (трехчастичная рекомбинация и обратный процесс) дает соотношение

$$c_0 = c_1 c p \kappa_p(T). \quad (4.45)$$

В (4.45)  $p$  — суммарное давление частиц, в идеально-газовом приближении равное

$$p = T(n_a + n_e + n_i) = nT(1 + \alpha), \quad (4.46)$$

$$p_k = n_k T = p c_k, \quad (4.47)$$

Здесь  $\kappa_p(T)$  — константа равновесия для процесса ионизации. У самого Саха константа равновесия введена как  $\kappa_s = \kappa_p^{-1}$ ,

$$\kappa_p(T) = e^{\sum_k \nu_k \zeta_k} T^{\sum_k c_k} p_k^{\nu_k} e^{-\sum_k \nu_k \varepsilon_{0,k}/T}. \quad (4.48)$$

Здесь введено обозначение  $\nu_k$  — стехиометрические коэффициенты реакции  $\sum_k \nu_k A_k = 0$ , для которых выполняется условие химического равновесия Гиббса–Дюгема:

$$\sum_k \nu_k \mu_k = 0. \quad (4.49)$$

В (4.49)  $\mu_k$  — химический потенциал  $k$ -й компоненты, который записывается в виде

$$\mu_k = T \ln p_k + \chi_k(T). \quad (4.50)$$

Функция  $\chi_k(T)$  может быть записана следующим образом:

$$\chi_k = -T \ln \frac{z_k}{g_k} - C_{p,k} T \ln T - T \ln g_k \left( \frac{m_k}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (4.51)$$

Здесь  $g_k$  — статистический вес основного состояния частицы,  $m_k$  — масса частицы,  $C_{p,k} = 5/2$ ,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $z_k$  — статистическая сумма по внутренним состояниям частиц сорта  $k$ . Для атомов ( $k = a$ ) значение  $\varepsilon_{m,a} = \varepsilon_m < 0$ ,

$$z_a = \sum_m e^{-\varepsilon_m/T}. \quad (4.52)$$

При низких температурах  $|\varepsilon_{0,k}| \gg T$  (индекс «0» означает основное состояние системы) функция (4.51) сводится к виду (в статсумме оставляется одно слагаемое для основного состояния)

$$\chi_k = \varepsilon_{0,k} - C_{p,k} T \ln T - T \zeta_k. \quad (4.53)$$

В (4.53)  $\zeta_k$  — химическая постоянная частиц сорта  $k$ , равная

$$\zeta_k = \ln \left[ g_k \left( \frac{m_k}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]. \quad (4.54)$$

Используя эти обозначения, получим для константы равновесия,  $g_e = 2$ :

$$\varkappa_p = \frac{g_a}{2g_1 T} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mT} \right)^{3/2} \cdot e^{I/T} = \frac{g_a}{2g_1 T} \lambda_e^3 e^{I/T}. \quad (4.55)$$

Здесь  $m$  — масса электрона,  $I = \varepsilon_{0,i} - \varepsilon_{0,a}$  — потенциал ионизации атома из основного состояния,  $\lambda_e = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mT}}$  — тепловая длина волны де-Бройля для электрона. Для степени ионизации  $\alpha$  получим

$$\varkappa_s = \varkappa_p^{-1} = \frac{\alpha^2}{1 - \alpha^2 p}. \quad (4.56)$$

В таком виде, взяв еще натуральный логарифм от обеих сторон (4.56), Саха записал свою формулу для оценки степени ионизации. Из (4.56) можно получить

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + p\varkappa_p}}. \quad (4.57)$$

Если выразить степень ионизации  $\alpha$  не через давление, а через концентрацию тяжелых частиц  $n$ :  $p = n(1 + \alpha)T$ , то для степени ионизации получим из (4.57):

$$\alpha = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + \frac{g_a}{2g_1} n \lambda_e^3 e^{I/T}}}. \quad (4.58)$$

Используя формулу (4.56), Саха рассчитал степень ионизации для следующих элементов: кальция (в диапазоне температур 2000–14000 К), для бария

(2000–12000 К) и стронция (2000–15000 К) и для давлений  $10^{-8}$ – $10$  атм. После вывода формулы Саха наступил период ее использования и обобщения на различные условия в плазме разнообразных физических систем, включая Солнце и другие, в которых выполняется условие термодинамического равновесия. Наиболее драматический парадокс, связанный с формальным применением формул для химических потенциалов (4.51)–(4.53), содержащих статистическую сумму по атомным состояниям, состоял в расходимости последней при учете бесконечного числа дискретных, вырожденных пропорционально квадрату главного квантового числа  $n$ , состояний. Здесь же возникал вопрос — как быть с суммированием по состояниям сплошного спектра, или по состояниям рассеяния во взаимодействующей системе, состоящей из электрона и положительного иона? Последний вопрос связан с тем, что мы рассматриваем две подсистемы, состоящие из электрона и положительного иона, но один раз объявляем их свободными, а второй раз взаимодействующими.

В связи с проблемой расходимости атомной статистической суммы, в которой суммирование производится по дискретным состояниям, в научной литературе было предложено много способов ограничения суммирования по главным квантовым числам, которые подробно изложены в книгах [68–71]. Отметим здесь способ ограничения статсуммы на значениях главного квантового числа, при котором радиус боровской орбиты сравнивается с характерными размерами системы. Это ограничение при температурах  $T$ , малых по сравнению с потенциалом ионизации  $I$ , равным величине  $Ry = 13,6$  эВ для атома водорода, дает значение статсуммы, близкое к величине, определяемой вкладом основного состояния атома (Бриллюэн [68]). С физической точки зрения более важным оказывается ограничение статсуммы такими радиусами боровских орбит, при которых происходит их перекрытие для соседних атомов (Э. Ферми [72]). При таком ограничении также вклад основного состояния является доминирующим при малых значениях  $I/T$ . Наиболее радикальный способ обрезания был предложен Планком [73], который ограничил суммирование в атомной статсумме значениями главного квантового числа, при котором энергия ионизации из состояния с таким значением  $n$ , равная  $I/n^2$ , сравнивается с температурой среды. Соответствующее главное квантовое число обрезания по Планку меньше, чем в первых двух способах в слабонеидеальной плазме. Существуют способы обрезания атомной статсуммы на радиусах орбит, сравнимых с дебаевским радиусом в плазме [69, 74]. Здесь же уместно упомянуть способ обрезания статсуммы, предложенный в работах [75, 76]) и состоящий в ограничении главных квантовых чисел значениями, при которых происходит перекрытие соседних спектральных линий серий, уширенных за счет электрических микрополей и соударений с электронами плазмы. Еще один, близкий по идеологии способ обрезания предложен Унзольдом [77] (см. также [78]), состоящий в ограничении главных квантовых чисел значениями, при которых под действием плазменных микрополей пропадают связанные состояния в возмущенных атомах. Упомянутые здесь способы ограничения статсуммы в слабонеидеальной плазме существенно слабее способа обрезания, предложенного Планком, так как температура

плазмы при этих условиях больше энергий взаимодействия, которые можно оценить для описанных механизмов обрезания.

Важно отметить, что сам Саха апеллировал к оптическим наблюдениям, а при выводе своей формулы учитывал вклад связанных состояний в давление. Проблема, с современной точки зрения, состоит в том, что понятие атома в физической модели плазмы, в которой исследуется гамильтониан системы взаимодействующих электронов и ионов (для простоты рассмотрения — протонов), является условным, так как такого оператора изначально в теории не существует. Под атомами реально понимается вклад дискретных состояний, возникающих из-за кулоновского взаимодействия, в те или иные физические, наблюдаемые ответы. Например, вклад связанных состояний в давление представлен вторым вириальным коэффициентом, который описывается сходящейся суммой по дискретным атомным состояниям и которая в большинстве работ совпадает со статсуммой Планка–Ларкина [79], см. также [80–88]; вириальное разложение было получено с использованием континуальных интегралов Фейнмана–Каца в работах [89–92], см. также [93].

Вклад в давление от связанных состояний можно записать следующим образом:

$$\delta p^{\text{BS}} = \zeta_e \zeta_p T \lambda_{\text{ep}}^3 \sigma^{\text{BS}}, \quad (4.59)$$

здесь  $\zeta_e$ ,  $\zeta_p$  — активности электронов и протонов,  $\lambda_{\text{ep}} = [2\pi\hbar^2/(\mu_{\text{ep}}T)]^{1/2}$ ,  $\mu_{\text{ep}} = m_e m_p / (m_e + m_p)$  — приведенная масса. Величину  $\sigma^{\text{BS}}$  в (4.59) можно представить в виде статсуммы по главному квантовому числу  $n$ :

$$\sigma^{\text{BS}} = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{u_n} F_n(u_n), \quad (4.60)$$

где  $u_n = R_y / (n^2 T)$ . В формуле Планка–Ларкина

$$F_n(u) = F_{p,l}(u) = 1 - e^{-u} - ue^{-u}. \quad (4.61)$$

Выполнив без ограничений суммирование по главному квантовому числу  $n$ , можно получить ( $X = \beta R_y$ ):

$$\sigma_{p,l}^{\text{BS}} = \sum_{k=2}^{\infty} \zeta(2k-2) \frac{X^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{n=4,6,8,\dots} \zeta(n-2) \frac{X^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}. \quad (4.62)$$

здесь и далее  $\zeta(n)$  —  $\zeta$ -функция Римана.

При малых, по сравнению с потенциалом ионизации, температурах, атомный вклад в давление совпадает с оценкой по формуле Саха. Следует отметить, что вклад Планка–Ларкина, полученный в цитированных здесь работах методами квантовой теории поля в статистической физике, в действительности представляет собой суммарный вклад дискретных состояний и, частично, состояний непрерывного спектра — состояний рассеяния. В работах [94–96] получен сходящийся вклад как для суммы только по дискретным состояниям, так и отдельно по состояниям рассеяния. В химической модели плазмы последний вклад обычно опускается. Интересно отметить, что суммарный вклад дискретных состояний и состояний рассеяния в главном приближении совпадает с формулой Планка–Ларкина [96]. Выражение для вклада в давление чисто атомных состояний может быть обобщено на предмет учета эффе

уширения уровней в плазме, с той же точностью, как это делается в теории излучения атомов в линиях [97, 98], тогда как такое же обобщение формулы Планка–Ларкина, содержащей суперпозицию вкладов дискретных состояний и состояний рассеяния, не представляется возможным. Такие же формулы для вклада только дискретных состояний были также получены в работе [99] с помощью диагонализации гамильтониана, в котором удержаны только связанные состояния, методом канонического преобразования, похожим на знаменитый метод Н. Н. Боголюбова [100].

При расчете излучения плазмы вклад атомных состояний представляется формулами Больцмана–Саха для атомных населенностей, умноженных на соответствующие вероятности спонтанного излучения, а также энергию испускаемых фотонов, и для полученной суммы, строго говоря, не требуется ограничений, так как эта сумма сходится из-за достаточно быстрого убывания коэффициентов Эйнштейна с ростом главных квантовых чисел. Никаких вычитаний, как в формулах типа Планка–Ларкина формально не требуется. Физически при больших значениях главного квантового числа необходимо учитывать механизмы слияния линий Инглиса–Теллера и обрезание высоко-возбужденных состояний микрополями плазмы по механизму Унзоляда. Для солнечной фотосферы сходимость вклада атомных состояний в давление по формуле Планка–Ларкина наступает при значениях главного квантового числа, меньшего 6, а дискретные линии серии Бальмера наблюдаются вплоть до  $n \approx 17$  [101]. Этот факт подчеркивает то, что понятие атома в строгом смысле не наблюдаемо, а вклад связанных состояний в то или иное физическое явление зависит от постановки задачи.

Еще один парадокс, возникающий при буквальном применении формулы Саха состоит в том, что значение концентрации нейтральных атомов в центре Солнца, где температура на два порядка больше потенциала ионизации, но значение плотности плазмы близко к  $150 \text{ г/см}^3$ , составляет около тридцати процентов от полного числа тяжелых частиц. Предел  $I/T \ll 1$ , строго говоря, нельзя применять в формуле Саха, при выводе которой было предположено обратное соотношение между температурой и потенциалом ионизации. Использование формулы Планка–Ларкина или SRM для солнечного ядра дает вклад в давление от нейтральных атомов, порядка  $(I/T)^2 \sim 10^{-4}$ . Если формально устремить заряд электрона и протона к нулю, что должно привести к исчезновению связанных состояний, то согласно формуле Саха останется конечное число нейтралов, относительное число которых определяется величиной  $\sim n_e \lambda_e^3$ , которая для солнечного ядра близка к единице, так как электроны здесь частично вырождены. Для вырожденной плазмы формула Саха, очевидно, неприменима, так как нарушается связь химического потенциала электронов с их концентрацией типа (4.50)–(4.51). Использование формул типа Планка–Ларкина дает правильный предел —  $n_a$  стремится к нулю, но также нуждается в корректировке с учетом вырождения.

Из формулы Саха, записанной в виде (4.57)–(4.58), следует, что с ростом давления или плотности газа степень ионизации монотонно убывает. Эксперименты, поставленные по измерению электропроводности адиабатически сжатого воздуха до давления 9000 атм [102] показали, что формула Саха справедлива вплоть до давлений порядка 50 атм. При больших давлениях (плотно-

стях) наблюдается увеличение концентрации электронов с ростом плотности. Для объяснения наблюдаемой зависимости электропроводности плазмы от плотности авторы (Карпенко и др.) предположили, что в плотной плазме происходит снижение потенциала ионизации, которое и приводит к экспериментально наблюдаемому эффекту. Теоретические оценки этого эффекта были даны в работе [103], в которой учитывается вклад взаимодействия заряженных частиц с нейтралами через поляризацию последних электрическим полем зарядов. Эти оценки качественно согласовались с экспериментальными данными. Позже аналогичную теорию развивал А. А. Ликальтер [104] применительно к экспериментальным данным по электропроводности цезия при переходе от больших плотностей, при которых проводимость близка к металлической, к малым плотностям, где плазменная проводимость на несколько порядков меньше [105, 106]. Теоретическое описание этих экспериментов, качественно согласующееся с ними по зависимости проводимости от плотности, было дано в работе [107], в которой взаимодействие электронов с нейтралами выражается по квантовой механике через длину рассеяния, а взаимодействие положительных ионов с нейтралами через поляризуемость атома, как в работах Б. Л. Тимана. Следует отметить, что вопрос о фазовом переходе кристаллического вещества при изменении плотности, ставился Н. Моттом (известном, как переход металл-диэлектрик (М-Д) или переход Н. Мотта [108]), где приводились соображения о том, что в разреженном веществе при нулевых температурах из-за сильного электростатического отталкивания электронов на одном центре возникает запрещенная зона, которая может захлопнуться с увеличением плотности вещества, и произойдет переход диэлектрик-металл. В качестве критерия такого перехода Мотт предложил условие равенства радиуса боровской орбиты атома дебаевскому радиусу плазмы.

В работе Я. Б. Зельдовича и Л. Д. Ландау [109] обсуждалась возможность перехода металл-диэлектрик (М-Д) при конечных температурах как фазового перехода первого рода, отличного от известных переходов жидкость-газ и жидкость-твердое тело. В этой работе обсуждался, в частности, вариант перехода (М-Д) в случае ртути, у которой критическая точка для перехода жидкость-газ достаточно низка (см. более поздние экспериментальные данные в работах [110, 111]), а для перехода металл-диэлектрик предполагалось существенно большее значение критической температуры. Предполагался вариант непроводящей жидкой фазы, а при переходе (М-Д) при температурах выше критической для перехода жидкость-газ должен иметь место фазовый переход со скачкообразным изменением электропроводности, объема и других свойств. В указанных выше и выполненных на двадцать лет позже экспериментах точка зрения о скачкообразном переходе проводимости в ртути не подтвердилась: наблюдается достаточно резкий, но без скачков, переход от металлической к малой по величине плазменной проводимости в районе критической плотности ртути.

Таким образом, со стороны больших плотностей плазмы имеется сильное отклонение от формулы Саха в ее классическом варианте, связанное с учетом кулоновского и других взаимодействий, меняющих значения химических потенциалов электронов и ионов. В области сильной неидеальности плазмы, когда кулоновское взаимодействие, характеризуемое дебаевским параметром

$\Gamma_D = e^2/(r_D T)$ , (где  $e$  — заряд электрона,  $r_D$  — дебаевский радиус плазмы,  $T$  — температура плазмы), который становится величиной порядка единицы, возможен плазменный фазовый переход (ПФП) впервые подробно описанный в работах Г. Э. Нормана и А. Н. Старостина [94, 112], где были сформулированы общие условия термодинамической устойчивости для химической модели сильно-неидеальной плазмы (см. также [113, 114]).

Там же [94, 112] были предложены гипотетические диаграммы фазового равновесия для ПФП, относительное взаимное расположение в координатах температура-плотность или давление-температура известных линий переходов типа жидкость-газ, жидкость-твердое тело и линий фазового перехода первого рода в неидеальной плазме, при котором происходит расслоение плазмы на фазы, отличающиеся плотностью и степенью ионизации, причем возможны кривые сосуществования фаз с двумя критическими точками. Для большинства металлов, у которых критическая точка для переходов жидкость-газ порядка 1 эВ, в окрестности критической точки вещество является сильно ионизованным и, в отличие от теории Ван-дер-Ваальса [55], правильное описание перехода жидкость-газ требует включения сильного кулоновского взаимодействия. В таких системах нового перехода, отличного от известных, может не возникнуть. В веществах с малой критической точкой перехода жидкость-газ, где ионизация незначительна, ПФП может наблюдаться при высоких температурах и плотностях, где возникает сильное кулоновское взаимодействие. В этих же работах [94, 112] указана ошибочность критерия термодинамической устойчивости неидеальной плазмы и следующего из него предсказания критической точки для ПФП, предложенного в работе [115, 116]. Позже аналогичный фазовый переход в неидеальной плазме был переоткрыт в работе [117] и анализировался для условий в недрах Юпитера (см. также обзоры [118–120]). В экспериментах по адиабатическому сжатию дейтерия при давлениях мегабарного диапазона и плотностях более одного грамма в кубическом сантиметре наблюдался характерный излом адиабаты в координатах давление-плотность, который авторы связывали с ПФП [121]. Для солнечных недр дебаевский параметр неидеальности мал в центре Солнца,  $\Gamma_D \approx 0,05$ , и вопросы, связанные с переходами типа Мотта или ПФП, не играют никакой роли в рамках подхода, основанного на разложении термодинамических потенциалов в ряд по малому параметру  $\Gamma_D$ . Использование разного рода обрезаний и исчезновения связанных состояний за счет дебаевской экранировки плазмы или влияния плазменных микрополей, является в этой области параметров неидеальности неконтролируемым превышением точности.

Современные подходы к систематическому расчету термодинамических функций слабонеидеальной плазмы основаны на использовании методов квантовой теории поля, из которых наибольшее распространение получила техника Мацубары [122, 123] или метод неравновесных функций Грина, разработанный в работах Г. Бейма, Л. Каданова и Л. Келдыша [124–126]. Фейнмановские диаграммы в технике Мацубары для рассматриваемых далее взаимодействий показаны на рис. 4.5.

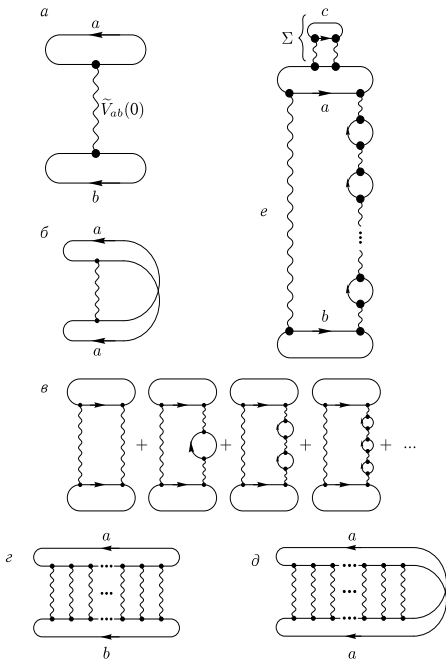


Рис. 4.5. Фейнмановские диаграммы в технике Мацубары [122, 123] (сплошная линия обозначает функцию Грина, волнистая линия — фурье-компоненту потенциала взаимодействия): *а* — хартриевская поправка, см. формулы (4.67), (4.105); *б* — приближение Хартри–Фока (обменное взаимодействие) (4.70); *в* — приближение Дебая–Хюккеля (4.71), (4.75); *г* — лестничная диаграмма (4.85), (4.86), (4.92); *д* — лестничная диаграмма (обменное взаимодействие) (4.139); *е* — диаграмма, описывающая влияние среды (учет собственно энергетической вставки  $\Sigma_c$  на экранирование Дебая–Хюккеля (4.84)

Приведем разложение для давления плазмы, состоящей из электронов и протонов в следующем виде:

$$p = p_0 + p_1 + p_{\text{н-ф}} + p_{\text{д-н}} + p_{\text{БС}} + p_{\text{СС}} + o(n^{5/2}), \quad (4.63)$$

где  $p_0$  — давление идеального, не взаимодействующего газа,

$$p_0 = (\zeta_e + \zeta_p)T, \quad \zeta_p = \frac{g_p e^{\mu_p/T}}{\lambda_p^3}. \quad (4.64)$$

Электроны могут быть вырождены (например, в центре Солнца  $n_e \lambda_e^3 \approx 0,6$ ), поэтому их активность  $\zeta_e$  мы будем выражать [55] через идеальную, но в общем случае для вырожденных частиц, концентрацию  $n_e^0$ :

$$\zeta_e = n_e^0(\mu_e) = \frac{2}{\lambda_e^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{\exp(x-y) + 1}. \quad (4.65)$$

Здесь  $\lambda_e = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m_e T}}$ ;  $y = \mu_e/T$ .

Соответственно, давление идеального газа вырожденных электронов записывается в виде [55]

$$p_{0e} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} T \frac{2}{\lambda_e^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{\exp(x-y) + 1}. \quad (4.66)$$

Первая поправка Хартри дается в виде

$$p_1 = \frac{4\pi e^2}{\varkappa^2} (\zeta_e - \zeta_p)^2, \quad (4.67)$$

регуляризованного с помощью параметра  $\varkappa$ , который необходимо устремить к нулю в окончательных ответах.

Для устранения расходимости следует потребовать условие электронейтральности в виде равенства активностей протонов и электронов. В общем случае многокомпонентной плазмы, состоящей из электронов и ионов с зарядом  $z_k$  условие электронейтральности в терминах активностей имеет вид

$$\zeta_e = \sum_k z_k \zeta_k, \quad (4.68)$$

а выражение (4.67) обобщается очевидным образом:

$$\frac{\delta\Omega_H}{V} = \frac{4\pi e^2}{\varkappa^2} \cdot \left( \zeta_e - \sum_k z_k \zeta_k \right)^2. \quad (4.69)$$

В следующем, приближении Хартри–Фока (см. рис. 4.5 б), получается известный [55, 124, 127] конечный ответ для обменной поправки за счет электрон-электронного взаимодействия. В случае невырожденных электронов, например, имеем [55] в первом борновском приближении

$$\frac{\delta\Omega_{\text{exch}}}{V} = -\frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e T} \zeta_e^2. \quad (4.70)$$

Здесь для  $\zeta_e$  следует брать невырожденный предел ( $\exp(-y) \gg 1$ ) в выражении (4.65):  $\zeta_e = 2\lambda_e^{-3} \exp(\mu_e/T)$ .

Следующие по потенциалу взаимодействия кольцевые диаграммы [128, 129] (см. рис. 4.5 *с*) приводят к вкладу Дебая–Хюккеля [130] (см., например, [69, 71, 79, 80, 83, 84, 123, 131, 132]):

$$\frac{\delta\Omega_{\text{Д-Н}}}{V} = -T \frac{\kappa_{\text{Д}}^3}{12\pi}. \quad (4.71)$$

Здесь  $\kappa_{\text{Д}}$  — обратный дебаевский радиус [123, 133],

$$\kappa_{\text{Д}}^2 = 4\pi e^2 \sum_k z_k^2 \left( \frac{\partial n_k}{\partial \mu_k} \right)_T. \quad (4.72)$$

Выражение (4.72) было строго получено Фрадким [133], который показал, что в правой части выражения (4.72) фигурируют производные от физических концентраций  $n_k$  по химическим потенциалам. В теории возмущений можно ограничиться значениями активностей,  $n_k^0(\mu_k) = \zeta_k$ .

Напомним, что физические концентрации связаны с химическими потенциалами соотношениями [55]

$$n_k = - \left( \frac{\partial(\Omega/V)}{\partial \mu_k} \right)_T. \quad (4.73)$$

Для физических концентраций имеет место традиционное соотношение электронейтральности:

$$n_e = \sum_k z_k n_k. \quad (4.74)$$

Дебай–хюккелевское приближение, представленное в статическом пределе вкладом кольцевых диаграмм [123] (см. рис. 4.5 *в*), содержит ряд поправок, которые могут быть получены с использованием техники [124, 125] (спины частиц положены для простоты равными 1/2):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{V} = & -4 \sum_{i,j} \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \lambda^2 \int \frac{d\mathbf{P} d\mathbf{q} d\mathbf{k}}{(2\pi)^9} \cdot \frac{\exp\left(-\beta(\varepsilon_k^{ij} - \varepsilon_q^{ij})\right) - 1}{\varepsilon_q^{ij} - \varepsilon_k^{ij}} \times \\ & \times n_i \left( \frac{m_i}{M} \mathbf{P} + \mathbf{q} \right) \left( 1 - n_i \left( \frac{m_i}{M} \mathbf{P} + \mathbf{k} \right) \right) \times \\ & \times n_j \left( \frac{m_j}{M} \mathbf{P} - \mathbf{q} \right) \left( 1 - n_j \left( \frac{m_j}{M} \mathbf{P} - \mathbf{k} \right) \right) \times \\ & \times \frac{16\pi^2 e^4 z_i^2 z_j^2}{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 \left[ (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 + 4\pi e^2 \lambda \Pi^R(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \mathbf{V} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{k})) \right]}, \end{aligned} \quad (4.75)$$

где интегрирование по параметру  $\lambda$  соответствует интегрированию по заряду  $e^2 \mapsto e^2 \lambda$ ;  $\mathbf{P}$  — полный импульс частиц  $i, j$ ;  $\mathbf{q}, \mathbf{k}$  — волновые векторы относительного движения центра масс до и после взаимодействия, соответственно;  $n_i(\mathbf{q})$  — числа заполнения для частиц сорта  $i$ ;  $m_i, z_i$  — масса и заряд (в элементарных единицах) частицы сорта  $i$ ;  $M = m_i + m_j$  — суммарная

масса;  $\varepsilon_k^{ij} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ ,  $\mu = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$  — приведенная масса частиц  $i$  и  $j$ ;  $\mathbf{V} = \mathbf{P}/M$ ,  $\hbar |\mathbf{V}| q \sim \hbar |\mathbf{V}| \varkappa_D < T$ .

Здесь рассмотрен общий случай, допускающий учет вырождения и нестатистические поправки. Учет вклада двух переключателей, содержащегося при суммировании кольцевых диаграмм, который надлежит вычесть из лестничных диаграмм (см. рис. 4.5 з, 4.5 д), описывающих взаимодействие пары частиц в континууме, соответствует замене  $4\pi e^2 \lambda \Pi^R$ , где  $\Pi^R$  — запаздывающий поляризационный оператор [123–126], определяемый суммой вкладов всех частиц, участвующих в экранировке кулоновского взаимодействия, в знаменателе последнего сомножителя в (4.75) на регуляризирующий параметр  $\varkappa^2$ .

Для невырожденного случая получим

$$\frac{\Delta\Omega}{V} = -\frac{T\varkappa_D^4}{4\pi^2} \int_0^1 \lambda d\lambda \int_0^\infty \frac{dq}{q^2 + 4\pi e^2 \lambda \Pi^R(q)}. \quad (4.76)$$

Здесь  $\varkappa_D^2 = 4\pi e^2 \Pi^R(0)$  — квадрат обратного дебаевского радиуса,  $\Pi^R(q) \equiv \Pi^R(|\mathbf{q}|) \equiv \Pi^R(\mathbf{q}, 0)$ ; в невырожденном случае  $\varkappa_D^2 = 4\pi e^2 \beta \sum_i z_i^2 n_i$ . В обычно используемом приближении, состоящем в замене  $\Pi^R(q)$  на его значение  $\Pi^R(0)$  из (4.76), (4.72) получим выражение (4.71).

Здесь необходимо сделать уточнение. В выражении (4.76) следует разложить  $\Pi^R(q)$  до второй производной по  $q$  [134]:

$$q^2 + 4\pi e^2 \lambda \Pi^R(q) \rightarrow q^2 \left( 1 + 2\pi e^2 \lambda \frac{\partial^2 \Pi^R}{\partial q^2}(0) \right) + 4\pi e^2 \lambda \Pi^R(0). \quad (4.77)$$

Введем величину  $a = |2\pi e^2 \Pi''(0)|$ , где  $\Pi'' \equiv \frac{\partial^2 \Pi^R}{\partial q^2}$ . Для этой величины получим [95, 134] выражение

$$2\pi e^2 \Pi''(0) = -\sum_i \frac{\pi \hbar^2 e^2 z_i^2}{m_i} \frac{\partial^2 n_i^0}{\partial \mu_i^2} + \frac{\pi \hbar^2}{9} \sum_i \frac{e^2 z_i^2}{m_i} \frac{\partial^3 (\overline{\varepsilon n}_i)}{\partial \mu_i^3}. \quad (4.78)$$

Здесь  $n_i^0$  — идеально-газовая концентрация,  $\overline{\varepsilon n}_i$  — усреднение кинетической энергии по числам заполнения для частиц сорта  $i$ :

$$\overline{\varepsilon n}_i = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{P^2}{2m_i} n_i(\mathbf{p}). \quad (4.79)$$

С учетом этого обстоятельства дебай-хюккелевская поправка принимает вид [95]

$$\frac{\Delta\Omega_{\text{Д-Н}}}{V} = -\frac{T\varkappa_D^3}{12\pi} f(a). \quad (4.80)$$

Здесь

$$f(a) = \frac{3}{2a^{3/2}} \left\{ \arcsin \sqrt{a} - \sqrt{a(1-a)} \right\}. \quad (4.81)$$

Оценки для водородной плазмы дают  $2\pi e^2 \Pi''(0) = -173\rho T^{-2}$  для невырожденного случая, здесь  $\rho$  — плотность вещества в г/см<sup>3</sup>,  $T$  — температура в эВ.

Для центра Солнца величина  $f(a)$  отличается от 1 в третьем знаке после запятой, что с учетом малости дебай-хюккелевской поправки, порядка  $10^{-2}$  по сравнению с идеально-газовым приближением, позволяет ограничиться для задач гелиосейсмологии приближением (4.71) ( $f(a) = 1$ ).

Для «истинного» радиуса экранировки флуктуаций заряда  $\Gamma_{\text{scr}} = \varkappa^{-1}$  из (4.77) получим

$$\varkappa^2 = \frac{\varkappa_D^2}{1 + 2\pi e^2 \Pi''(0)}. \quad (4.82)$$

Из приведенных оценок для величин  $\Pi''(0)$  следует, что при температуре плазмы  $T \approx 1$  эВ, условие  $1 + 2\pi e^2 \Pi''(0) = 0$  выполняется при  $n_e \approx 3 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ . В этих условиях, однако, параметр неидеальности  $\gamma = n^{1/3} e^2 / T \approx 2$  и данные выражения (4.78) для  $\Pi''(0)$  нуждаются в уточнениях. В области, где  $\varkappa^2 < 0$ , образуется волна зарядовой плотности, а дебаевская экранировка пропадает. Параметр, по которому следует учитывать поправки  $\sim a$ , соответствует  $(\lambda_e \varkappa_D)^2$ , который оказывается не слишком малым в центре Солнца (близость функции  $f(a)$  к единице связана с малостью численного коэффициента при этом параметре). Отношение тепловой длины де-Бройля для электрона к дебаевскому радиусу характеризует квантовые эффекты в процессе дебаевской экранировки, а соответствующие поправки к выражениям (4.71), (4.80) (при  $f(a) = 1$ ) носят название дифракционных поправок [132]. Их легко получить в невырожденном случае ( $n_i \ll 1$ ) из (4.75) в приближении  $4\pi e^2 \lambda \Pi^R(\mathbf{q} - \mathbf{k}, 0) = \lambda \varkappa_D^2$  с учетом экспоненциальных множителей и энергетических знаменателей, содержащихся в этом выражении. В первом приближении по параметру  $\lambda \varkappa$  получим (см. [132]) выражение

$$\frac{\Delta \Omega_{\text{dif}}}{V} = \frac{\pi^{3/2}}{4} T \left( \frac{e^2}{T} \right)^2 \left\{ \lambda_{ee} \zeta_e^2 + 2\zeta_e \sum_k \zeta_k z_k^2 \lambda_{ek} + \sum'_{kj} \zeta_k \zeta_j z_k^2 z_j^2 \lambda_{kj} \right\}. \quad (4.83)$$

Здесь  $\lambda_{ee} = \frac{\hbar}{\sqrt{m_e T}}$ ;  $\lambda_{ek} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu_{ek} T}}$ ;  $\lambda_{kj} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu_{kj} T}}$ .

Отметим также еще один класс поправок к дебай-хюккелевскому приближению, полученных впервые в работе [79] (см. также [83, 132]). Физически эти поправки связаны с тем, что в экранировке участвуют не свободные частицы, а частицы, взаимодействующие со средой («одетые» частицы, см. рис. 4.5 е).

Таким образом имеем поправку к дебай-хюккелевскому члену (индекс «cl» означает, что данный результат имеет классическую природу)

$$\frac{\delta \Omega_{\text{cl}}}{V} = -\frac{\pi}{3} T \left( \frac{e^2}{T} \right)^3 \left( \sum_i \zeta_i z_i^4 \right) \left( \sum_j \zeta_j z_j^2 \right). \quad (4.84)$$

В (4.84) суммирование идет по всем сортам частиц. В работе [79] вместо  $\pi/3$  фигурирует коэффициент  $\pi/2$ , который впоследствии приводился также в работе [83]. В книге [69] этот член в разных местах записан то с коэффициентом  $\pi/3$ , то  $\pi/2$ . Выполненная авторами [64] независимая проверка

показывает, что правильное значение коэффициента равно  $\pi/3$ . Отметим, что эта поправка мала по сравнению с «большим» логарифмическим членом.

Рассмотрим вклад величин  $p_{BS}$  и  $p_{SS}$ , фигурирующих в формуле (4.63) (см. рис. 4.5  $\varepsilon$ ). В технике Мацубары [122, 123] для  $\delta\Omega/V = -\delta p$  имеем (интегрирование по  $\lambda$  подразумевает замену  $e^2 \mapsto e^2\lambda$ ):

$$\frac{\delta\Omega_L}{V} = \frac{2}{\beta} \sum_{i,\omega} \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} G_i(\mathbf{P}, \omega) \Sigma_i(\mathbf{P}, \omega). \quad (4.85)$$

Здесь выполняется суммирование по частотам  $\omega$  (или  $p_4$ ); для фермионов  $\omega = \pi T(2n+1)$ , индекс « $L$ » означает лестницу (ladder),  $G_i(\mathbf{P}, \omega)$  — функция Грина частицы сорта  $i$  с импульсом  $\mathbf{P}$  и частотой  $\omega$  в технике Мацубары [123], а собственно-энергетическую часть  $\Sigma_i(\mathbf{P}, \omega)$  можно выразить через двухчастичную вершину  $\Gamma_{ij}$ , найденную в лестничном приближении [127]:

$$\Sigma_i(\mathbf{p}) = \frac{2}{\beta} \sum_{j,k_4} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} G_j(\mathbf{k}) \Gamma_{ij} \left( \frac{m_j \mathbf{p} - m_i \mathbf{k}}{m_i + m_j}; \frac{m_j \mathbf{p} - m_i \mathbf{k}}{m_i + m_j}; \mathbf{p} + \mathbf{k} \right). \quad (4.86)$$

Например, для электрон-протонного взаимодействия  $m_i = m_e$ ,  $m_j = m_p$ ,  $\mathbf{p} = (\mathbf{P}, p_4) \equiv (\mathbf{P}, \omega)$  — 4-импульс электрона,  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}, k_4)$  — соответственно для протона. Величина  $\Gamma_{ij}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathfrak{P})$  ( $\mathbf{q}, \mathbf{q}'$  — относительный 4-импульс до и после рассеяния,  $\mathfrak{P} = \mathbf{p} + \mathbf{k} = (\mathbf{P}, P_4)$  — суммарный 4-импульс) в лестничном приближении для малых чисел заполнения ( $n \ll 1$ ) может быть записана в следующем виде [80, 127]:

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathfrak{P}) = (2\pi)^3 \sum_n \left( iP_4 - \frac{\hbar^2 P^2}{2M} - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} + \mu_i + \mu_j \right) \times \\ \times \frac{\tilde{\Psi}_n(\mathbf{q}) \tilde{\Psi}_n^*(\mathbf{q}') \left( E_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} \right)}{iP_4 - \frac{\hbar^2 P^2}{2M} - E_n + \mu_i + \mu_j}. \quad (4.87)$$

Здесь  $M = m_i + m_j$ ,  $\mu = \frac{m_i m_j}{M}$ ;  $\mu_i, \mu_j$  — химические потенциалы;  $E_n$  — энергия связи состояния с главным квантовым числом  $n$ ; суммирование по  $n$  распространяется в общем случае как по дискретным состояниям с квантовыми числами  $\{n\} = (n, l, m)$ , характеризующимися волновыми функциями относительного движения частиц  $i$  и  $j$  (связанные состояния электронов в поле протонов)  $\tilde{\Psi}_n(\mathbf{q})$ , так и по состояниям непрерывного спектра. Знак  $\sim$  над волновой функцией означает фурье-компоненту в импульсном пространстве.  $P_4 = 2\pi nT$  — четвертая компонента суммарного импульса. Для состояний рассеяния, отвечающих континууму, вместо суммы по дискретным состояниям  $\{n\}$  имеет место интегрирование по импульсам  $\mathbf{k}$ , характеризующим волновую функцию на бесконечности (в поле короткодействия — плоскую волну). Используя уравнение Шрёдингера в импульсном представлении и тео-

рему полноты для волновых функций ( $\tilde{V}(\mathbf{q})$  — кулоновский потенциал взаимодействия в импульсном представлении),

$$\left(E_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\right) \tilde{\Psi}_n(\mathbf{q}) = \int \tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\Psi}_n(\mathbf{q}') \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3}, \quad (4.88)$$

можно преобразовать амплитуду рассеяния к следующему виду:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathfrak{P}) = \\ = \tilde{V}_{ij}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') + (2\pi)^3 \sum_n \frac{\tilde{\Psi}_n(\mathbf{q}) \tilde{\Psi}_n^*(\mathbf{q}') \left(E_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\right) \left(E_n - \frac{\hbar^2 q'^2}{2\mu}\right)}{iP_4 - \frac{\hbar^2 P^2}{2M} - E_n + \mu_i + \mu_j}. \end{aligned} \quad (4.89)$$

С помощью (4.85) и (4.86) запишем  $\delta\Omega$  в виде

$$\frac{\delta\Omega}{V} = \sum_{i,j} \frac{4}{(2\pi)^6 \beta^2} \sum_{q_4, P_4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \int d\mathbf{q} d\mathbf{P} G_i\left(\frac{m_i}{M}\mathfrak{P} + \mathbf{q}\right) G_j\left(\frac{m_j}{M}\mathfrak{P} - \mathbf{q}\right) \Gamma_{ij}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathfrak{P}). \quad (4.90)$$

Выполняя суммирование по частотам  $q_4$  и  $P_4$  и интегрируя по  $d\mathbf{P}$  в невырожденном случае из (4.90) и (4.87) получим

$$\frac{\delta\Omega_L}{V} = \sum_{i,j} \zeta_i \zeta_j \lambda_{ij}^3 \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_n \exp(-\beta E_n) \left(E_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\right) |\tilde{\Psi}_n(\mathbf{q})|^2 \quad (4.91)$$

(ср. [95]; в дальнейшем мы будем использовать также выражение (4.89) для  $\Gamma_{ij}$ ). Здесь использованы активности  $\zeta_i$  (ср. (4.64)),  $\lambda_{ij} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{\mu\Gamma}}$ . В дискретном случае для взаимодействующих электрона и протона  $E_n = -Ry/n^2$ , в континууме  $E_k = \hbar^2 k^2/2\mu$ . Для двух частиц  $i$  и  $j$ , взаимодействующих через короткодействующий потенциал  $V = \lambda V_0(\mathbf{r})$ , из (4.91) можно получить формулу Бета-Уленбека [55, 135, 136].

Если использовать представление (4.89) для величины  $\Gamma_{ij}(\mathbf{q}, \mathbf{q}; \mathfrak{P})$ , фигурирующей в (4.90), для вклада лестничных диаграмм, то нетрудно видеть, что вклад от  $\tilde{V}_{ij}(0) \sim e^2/\varkappa^2$  исчезает из-за соотношения нейтральности в активностях (4.68). После суммирования по  $q_4$  и  $P_4$  в (4.90) с использованием вклада второго члена выражения (4.89), получим (см. рис. 4.5 з)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega_L}{V} = \sum_{i,j} \zeta_i \zeta_j \lambda_{ij}^3 \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_n \left(E_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\right) \times \\ \times |\tilde{\Psi}_n(\mathbf{q})|^2 \left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta \varepsilon_q)\right). \end{aligned} \quad (4.92)$$

В формуле (4.92) для е-р взаимодействия следует суммировать как по дискретному спектру (связанным состояниям), так и интегрировать по состояни-

ям рассеяния, характеризуемым индексом  $\mathbf{k}$ . Для  $e$ - $e$  и  $p$ - $p$  взаимодействий имеет смысл только последняя операция.

Для вычисления вклада связанных состояний в ВВК воспользуемся точным результатом Фока [137] для волновых функций нерелятивистского атома водорода в импульсном представлении:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{l,m} \left| \tilde{\Psi}_{n,l,m}(\mathbf{q}) \right|^2 = \frac{8}{\pi^2 a_0^5 n^3 (q^2 + p_n^2)^4}. \quad (4.93)$$

Здесь  $p_n = (a_0 n)^{-1}$ ;  $a_0 = \hbar^2 / \mu e^2 \lambda$  — боровский «радиус» с текущим зарядом  $e^2 \lambda$ . Учитывая, что  $E_n \equiv -\hbar^2 p_n^2 / 2\mu$ , ту часть выражения (4.92), которая соответствует связанным состояниям, с учетом (4.93) можно записать в виде

$$\frac{\delta \Omega^{\text{BS}}}{V} = -4 \zeta_e \zeta_p \frac{\mu^4 \lambda_{\text{ep}}^3 e^{10}}{\pi^2 \hbar^8} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \int_0^1 d\lambda \lambda^4 \left[ \exp\left(\frac{\lambda^2 X}{n^2}\right) \int \frac{d\mathbf{q}}{(q^2 + p_n^2)^3} - \int \frac{d\mathbf{q}}{(q^2 + p_n^2)^3} \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\right) \right]. \quad (4.94)$$

Здесь  $X = \beta R\gamma$ .

Используя (4.94), получим после интегрирования по  $\lambda$  следующие выражения:

$$\frac{\delta \Omega^{\text{BS}}}{V} = -\zeta_e \zeta_p T \lambda_{\text{ep}}^3 \sigma^{\text{BS}}. \quad (4.95)$$

$$\sigma^{\text{BS}} = \sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{u_n} F(u_n), \quad (4.96)$$

$$F(u) = 1 - e^{-u} \left( 4 - \frac{6}{\sqrt{\pi}} u^{1/2} + \frac{4}{\sqrt{\pi}} u^{3/2} \right) + \text{erfc} \sqrt{u} \cdot (3 - 4u + 4u^2), \quad (4.97)$$

где

$$u_n = \frac{\alpha^2}{n^2}, \quad \alpha = \alpha_{\text{ep}} = \sqrt{\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 T}} = \sqrt{\beta R\gamma} = \sqrt{X}. \quad (4.98)$$

Асимптотически при  $u \rightarrow 0$  ( $n \gg 1$ , или для больших  $T$ ) из (4.97) следует, что

$$F(u) \sim 2u^2. \quad (4.99)$$

Это в 4 раза больше чем аналогичное выражение Планка–Ларкина,

$$F_{\text{P.L.}}(u) = 1 - e^{-u} - u e^{-u} \sim \frac{u^2}{2} \text{ при } u \rightarrow 0. \quad (4.100)$$

Окончательно статсумма для связанных состояний может быть записана в следующем виде

$$\sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} = \sum_{k=4}^{\infty} \zeta(k-2) \frac{(-\alpha)^k}{\Gamma\left(\frac{k}{2} + 1\right)} (k-2)^2 + \sum_{k=1}^{\infty} \zeta(2k+1) \frac{\alpha^{2k+3}}{\Gamma\left(k + \frac{5}{2}\right)}. \quad (4.101)$$

Здесь  $\zeta(n)$  –  $\zeta$ -функция Римана. Соответствующая формула Планка–Ларкина имеет вид

$$\sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}} = \sum_{k=2}^{\infty} \zeta(2k-2) \frac{\alpha^{2k}}{\Gamma(k+1)} = \sum_{n=4,6,8,\dots} \zeta(n-2) \frac{\alpha^n}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}. \quad (4.102)$$

Обозначим разницу между величинами  $\sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}}$  (4.102) и  $\sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}}$  (4.101):

$$\sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}} - \sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} = \sigma_c. \quad (4.103)$$

Для  $\sigma_c$  имеем

$$\begin{aligned} \sigma_c = & \sum_{k=2}^{\infty} \zeta(2k-2) \frac{\alpha^{2k}}{\Gamma(k+1)} - \\ & - \sum_{k=4}^{\infty} \zeta(k-2) \frac{(-1)^k \alpha^k}{\Gamma(\frac{k}{2}+1)} (k-2)^2 - \sum_{k=1}^{\infty} \zeta(2k+1) \frac{\alpha^{2k+3}}{\Gamma(\frac{k}{2}+1)}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

Вычитаеый член в выражении (4.92) может быть представлено, например, для е-р взаимодействия с учетом теоремы о полноте функций, включающих дискретный и непрерывный спектры, в виде (см. рис. 4.5 а)

$$\begin{aligned} -\zeta_e \zeta_p \lambda_{ep}^3 \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \exp(-\beta \varepsilon_q) \left( \sum_n + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right) \times \\ \times \int \tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\Psi}_{\{n\}}^*(\mathbf{q}) \tilde{\Psi}_{\{n\}}(\mathbf{q}') \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} = -\zeta_e \zeta_p \tilde{V}_{ep}(0), \end{aligned} \quad (4.105)$$

то есть вычитаеый член в (4.92) в точности компенсирует первый член в представлении (4.89) для  $\Gamma_{ep}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathfrak{P})$ , который в силу нейтральности в активностях (4.68), зануляется после суммирования по всем парным взаимодействиям. Таким образом, полученная конечная статистическая сумма (4.96)–(4.97) соответствует учету в контрчлене (4.105) лишь суммирования по связанным состояниям. Интеграл по состояниям рассеяния в представлении (4.92) также оказывается конечным, но только после вычитания вклада от куска лестницы с двумя перекладами, учтенными при суммировании вклада кольцевых диаграмм.

В работах [96, 138] исследовалось влияние вырождения электронов на вклад связанных состояний в давление плазмы.

Вклад связанных состояний с учетом вырождения электронов в приближении малых населенностей может быть получен в следующем виде ( $m_e \ll m_p$ ):

$$\delta p_{\text{ed}}^{\text{BS}} = \zeta_p \frac{32}{\pi} \text{Ry} \sum_{n=1}^{\infty} 2 \int_0^1 \lambda d\lambda \int_0^{\infty} \frac{t^2 dt}{(1+t^2)^3} \frac{\exp(\lambda^2 u_n^2 (1+t^2)) - 1}{\exp(\lambda^2 u_n^2 t^2 - y_e) + 1}. \quad (4.106)$$

Это выражение было получено без учета паулиевской блокировки в вычислении амплитуды рассеяния с использованием метода В. М. Галицкого [139].

Для умеренных величин  $y_e$  кажется что при больших  $T \gg R_y$  интеграл слабо растет при увеличении  $y_e$ :  $\delta p_{\text{ед}}^{\text{BS}} \rightarrow p_{\text{as},1} = \zeta_p T (2\pi^2/3)(R_y/T)^2$ , однако для больших  $y_e$  можно показать, что вклад растет суб-экспоненциально:

$$\delta p_{\text{ед}}^{\text{BS}} \rightarrow p_{\text{as},2} = \zeta_p T \left( \frac{2\pi^2}{3} \left( \frac{R_y}{T} \right)^2 + \frac{64\zeta(3)}{15\pi} \left( \frac{R_y}{T} \right)^{5/2} \frac{\exp(y_e)}{y_e^{3/2}} \right). \quad (4.107)$$

Полученные выражения ( $X = R_y/T$ ) справедливы при несильном вырождении, так как они получены из выражения для амплитуды рассеяния (4.89), справедливым при малых числах заполнения электронов и ионов.

В работе [140] приводились оценки по теории возмущений сдвигов энергетических уровней связанных состояний атомов и молекул за счет эффектов паулиевской блокировки и обменных эффектов. С ростом плотности плазмы суммарный эффект, связанный с вырождением электронов приводит к полной ионизации атомов в отличие от экспоненциального роста атомной статсуммы с увеличением величины  $y_e$  по (4.107). Качественно это означает, что в сильно вырожденных системах, типа белых карликов связанные состояния отсутствуют в отличие от наивного представления, получаемого при использовании формулы Саха, обобщенной на случай вырождения.

В работе [141] приводится обобщение выражений для вклада связанных состояний с учетом влияния плазмы на спектральные характеристики атомных состояний, уширенных плазменными микрополями и соударениями с электронами.

Отметим, что выражения типа (4.92) получаются в технике Келдыша (см. [124–126]):

$$\delta p = \sum_a (2S_a + 1) \hbar \int_0^1 \frac{d\lambda}{2\lambda} \int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} \times \\ \times \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\Sigma_a^>(\hbar\mathbf{P}, \hbar\omega) G_a^<(\hbar\mathbf{P}, \hbar\omega')}{\omega - \omega'} (1 - e^{-\beta\hbar(\omega - \omega')}). \quad (4.108)$$

Выражая величину  $\Sigma^>$  символически через мнимую часть амплитуды рассеяния  $\Gamma_{\text{ep}}$  [124]

$$\Sigma_e^> \sim \int \text{Im} \Gamma_{\text{ep}}(\hbar\omega + \hbar\Omega) \cdot G_i^<(\hbar\mathbf{P}', \hbar\Omega) \frac{d\mathbf{P}' d\Omega}{(2\pi)^4}, \quad (4.109)$$

для  $\Gamma_{\text{ep}}$  имеем (ср. (4.89))

$$\text{Im} \Gamma_{\text{ep}} \sim \sum_n \left| \tilde{\Psi}_n(\mathbf{q}) \right|^2 (E_n - \varepsilon_q)^2 \delta_\gamma \left( \hbar\omega + \hbar\Omega - E_n - \frac{\hbar^2 P^2}{2M} \right), \quad (4.110)$$

$\delta_\gamma(x)$  — лоренцев контур, переходящий в  $\delta$ -функцию в пределе нулевой ширины  $\gamma \rightarrow 0$ . Из (4.108)–(4.110) получается выражение (4.92). В то же время такой подход позволяет учесть эффекты уширения атомных состояний с той же точностью, с которой можно вычислить спонтанное излучение системы заряженных частиц с учетом дискретно-дискретных переходов. В случае

учета штарковских микрополей, вызывающих сдвиги уровней и статистическое уширение линий, этот подход содержит также эффекты разрушения состояний микрополями [77, 95, 142].

Из (4.108) можно получить общую форму вклада связанных состояний (используется параметризация,  $e^2 \mapsto e^2\lambda$ )

$$\sigma^{\text{BS}} = \beta \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int d\omega \sum_{n=1}^{\infty} (E_n - \varepsilon_q)^2 \left| \tilde{\Psi}_n(q) \right|^2 \frac{e^{-\beta\hbar\omega} - e^{-\beta\varepsilon_q}}{\varepsilon_q - \hbar\omega} a_n(\omega - E_n/\hbar), \quad (4.111)$$

где  $\mathbf{q}$  — волновой вектор относительного движения частиц,  $q = |\mathbf{q}|$ ,  $a_n(\omega)$  — контур атомного состояния  $n$ , уширенный ионами и электронами плазмы [143].

Используя представление (4.93) и принимая во внимание, что

$$E_n = -\frac{\hbar^2 P_n^2}{2\mu}, \quad E_n - \varepsilon_q = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(q^2 + P_n^2), \quad \varepsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}, \quad \int d\mathbf{q} = 4\pi \int_0^{\infty} q^2 dq, \quad (4.112)$$

и используя безразмерные переменные

$$x = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu T}, \quad y = \beta\hbar\omega, \quad z = \frac{\hbar^2 P_n^2}{2\mu T} = -\beta E_n = u_n \lambda^2, \quad (4.113)$$

окончательно получаем

$$\sigma^{\text{BS}} = \sum_{n=1}^{\infty} G_n = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \int_0^{u_n} \frac{8}{\pi} z^{3/2} dz \int_{-\infty}^{\infty} dy \cdot \tilde{a}_n(y+z) \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}(e^{-y} - e^{-x}) dx}{(x+z)^2(x-y)}. \quad (4.114)$$

Интеграл по  $x$  в (4.114) можно вычислить аналитически:

$$\mathcal{I} = -\frac{\sqrt{\pi} - \pi \tilde{F}(z) \left(1 + \frac{1}{2z}\right)}{z+y} + \begin{cases} \frac{\pi e^{-y}(z-y)}{2\sqrt{z}(z+y)^2} - \frac{\pi(\tilde{F}(z) - \tilde{G}(y))}{(z+y)^2}, & y > 0 \\ \frac{\pi e^{-y}(\sqrt{z} - \sqrt{-y})^2}{2\sqrt{z}(z+y)^2} - \frac{\pi(\tilde{F}(z) - \tilde{F}(-y))}{(z+y)^2}, & y < 0, \end{cases} \quad (4.115)$$

$$\text{где } \tilde{F}(x) = e^x \sqrt{x} \operatorname{erfc} \sqrt{x}, \quad \tilde{G}(x) = \sqrt{x} \operatorname{Im} w(\sqrt{x}), \quad (4.116)$$

$$\operatorname{erfc} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt, \quad w(z) = e^{-z^2} \left( 1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt \right) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz), \quad (4.117)$$

и обе ветви представляют одно и то же аналитическое выражение.

Если уширение не учитывается,  $\tilde{a}_n(y) = \delta(y)$ , и интеграл по  $y$  в (4.114) равен

$$I_\omega \Big|_{a_n \equiv \delta} = I_{\delta\omega} = \left\{ \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}(e^{-y} - e^{-x})}{(x+z)^2(x-y)} dx \right\} \Big|_{y=-z} = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}(e^z - e^{-x})}{(x+z)^3} dx. \quad (4.118)$$

Аналитическое интегрирование по  $x$  дает выражение

$$\sigma^{\text{BS}} \Big|_{a_n \equiv \delta} = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \int_0^{u_n} dz \left( e^z - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{z}(1+2z) - e^z \operatorname{erfc} \sqrt{z} (1-4z-4z^2) \right). \quad (4.119)$$

После интегрирования в (4.119) (см. [144]) получается уже известный результат (4.95)–(4.97).

При учете влияния столкновительного уширения для атомного состояния с главным квантовым числом  $n$  ( $n \geq 2$ ) используется следующая формула [143]:

$$a_n(\omega) = \frac{1}{\pi} \int \frac{\mathcal{H}(x)\gamma_n(\omega) dx}{(B_n \mathcal{E}_0 x - \omega)^2 + \gamma_n^2(\omega)}, \quad x = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0}, \quad (4.120)$$

$$\mathcal{E}_0 = 2\pi \left( \frac{4}{15} \right)^{2/3} Z e N^{2/3}, \quad B_n = \left( \frac{3}{8} \right)^{2/3} \frac{\hbar}{Z m_e e} (n^2 - n'^2), \quad (4.121)$$

$$\gamma_n(\omega) = \gamma_{en} \begin{cases} 1, & \omega > 0 \\ e^{-\beta \hbar |\omega|}, & \omega < 0 \end{cases}, \quad (4.122)$$

$$\gamma_{en} = \frac{32}{3} N \langle v \rangle^{-1} \frac{\hbar^2}{m_e^2} \left( \max \left( 1, \ln \frac{R_D}{\rho_0} \right) + 0,215 \right) I(n, n'). \quad (4.123)$$

Здесь  $\mathcal{H}(x)$  — функция Хольцмарка (см. ниже),  $\mathcal{E}$  — напряженность ионного поля,  $\mathcal{E}_0$  — его характеристическое значение,  $B_n$  — эффективная постоянная Штарка для состояния  $n' = 1$ ,  $N = N_A \rho$ ;  $\gamma_{en}$  — эффективная константа уширения электронным ударом,  $\langle v \rangle$  — средняя скорость,  $\rho_0$  — радиус Вайскопфа,  $R_D = r_D^{-1}$  — дебаевский радиус. Основное состояние ( $n = 1$ ) может считаться неуширенным,  $\gamma_1 \rightarrow 0$ ,

$$\langle v \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2T}{m_e}}, \quad I(n, n') = \frac{1}{2}(n^4 + n'^4). \quad (4.124)$$

Мы используем радиус Вайскопфа, как определено в [143] (формула (22.33)),

$$\rho_0^2 = \frac{2}{3} \left( \frac{e^2}{\hbar \langle v \rangle} \right)^2 I(n, n') a_0^2. \quad (4.125)$$

Принимая во внимание параметризацию  $e^2 \mapsto e^2 \lambda$ , получаем

$$\rho_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar}{\mu \langle v \rangle} \sqrt{n^4 + 1}. \quad (4.126)$$

Функция Хольцмарка, используемая в (4.120), задается в виде

$$\mathcal{H}(x) = \frac{2}{\pi x} \int_0^{\infty} t \sin t \exp \left[ - \left( \frac{t}{x} \right)^{3/2} \right] dt. \quad (4.127)$$

Для статсуммы, представленной в виде (4.114), для случая без учета уширения

$$G_n \equiv G_n^{N-B} = n^2 e^{u_n} F(u_n) \sim \frac{2\alpha^4}{n^2} \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (4.128)$$

Оценки и вычисления показывают, что асимптотически отношение членов статсуммы с учетом и без учета уширения

$$G_n^B / G_n^{N-B} \sim \ln n \text{ при } n \rightarrow \infty, \quad (4.129)$$

что гарантирует сходимость статсуммы с учетом уширения. В действительности статсумма  $\sigma^{\text{BS}}$  должна ограничиваться первыми  $n_l$  состояниями, для которых безразмерный потенциал ионизации,  $u_n = \alpha^2/n^2$ , больше безразмерной характеристической энергии,  $B = \beta \hbar B_n \mathcal{E}_0$ . В расчетах использовалось сглаженное ограничение числа учитываемых состояний введением весового фактора состояния  $w_n$ :

$$\sigma_s^{\text{BS}} = \sum_n w_n G_n, \quad w_n = \min(1, e^{-\tau}), \quad \tau = \frac{B - u_n}{u_n}. \quad (4.130)$$

Отметим, что существуют более правильные способы учета функции распределения микрополей (см. например экспоненциальное приближение с настраиваемыми параметрами (АРЕХ) [145]). Для приложений гелиосейсмологии приближение Хольцмарка применимо, поскольку параметр неидеальности  $\Gamma_D = \varkappa_D e^2 / T \ll 1$ .

Для вычисления вклада состояний непрерывного спектра в выражения, подобные (4.92), необходимо определить фурье-компоненты волновых функций, которые описывают взаимное рассеяние заряженных частиц. Удобно использовать систему кулоновских волновых функций как сумму по орбитальным моментам [146]. В импульсном представлении имеем:

$$\tilde{\Psi}_k(q) = (2\pi)^{-3/2} \exp(\pi \tilde{\xi} / 2) \Gamma(1 - i \tilde{\xi}) J_{\varkappa}, \quad (4.131)$$

$$J_{\varkappa} = \left( \frac{2\pi(1 - i \tilde{\xi}) \varkappa}{\left( \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2}{2} + \frac{\varkappa^2}{2} \right)^2} + \frac{2\pi \tilde{\xi} (k + i \varkappa)}{\left( \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2}{2} + \frac{\varkappa^2}{2} \right) \left( \frac{q^2 - k^2 + \varkappa^2}{2} - ik \varkappa \right)} \right) \times \\ \times \exp \left( i \tilde{\xi} \ln \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 + \varkappa^2}{q^2 - k^2 + \varkappa^2 - 2ik \varkappa} \right). \quad (4.132)$$

Здесь  $\tilde{\xi} = (a_0 k)^{-1} = (\mu e^2 \lambda) / (\hbar^2 k)$ . Первый член в (4.132) подобен регуляризованной трехмерной  $\delta$ -функции с использованием параметра  $\varkappa$ ,  $\varkappa \rightarrow 0$ .

Подобные выражения могут быть также получены для «е-е» взаимодействия заменой  $m_p \rightarrow m_e$ .

Учитывая вычитание в множителе ( $e^{-\beta E_k} - e^{-\beta \varepsilon_q}$ ) в (4.92), например, для «е-р» взаимодействия можно преобразовать выражение (4.92) для непрерывного спектра состояний рассеяния (SS) к виду

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Omega_{\text{ep}}^{\text{SS}}}{V} = & -\frac{\lambda_{\text{ep}}}{\pi} \zeta_e \zeta_p T \left( \frac{e^2}{T} \right)^2 \int_0^1 \lambda d\lambda \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy \frac{\pi \tilde{\xi}_{\text{ep}}}{\text{sh} \pi \tilde{\xi}_{\text{ep}}} \exp \left( \pi \tilde{\xi}_{\text{ep}} \right) \frac{e^{-y} - e^{-x}}{x - y} \times \\ & \times \left( \frac{1}{(\sqrt{x} - \sqrt{y})^2 + \tilde{\eta}_{\text{ep}}^2} - \frac{1}{(\sqrt{x} + \sqrt{y})^2 + \tilde{\eta}_{\text{ep}}^2} \right) \times \\ & \times \exp \left[ -2\tilde{\xi}_{\text{ep}} \text{Im} \ln \left( x - y + \tilde{\eta}_{\text{ep}}^2 + i2\sqrt{y\tilde{\eta}_{\text{ep}}^2} \right) \right], \quad (4.133) \end{aligned}$$

$$\text{где } \tilde{\xi}_{\text{ep}} = \frac{\lambda \alpha_{\text{ep}}}{\sqrt{y}}, \quad \alpha_{\text{ep}} = \sqrt{\text{Ry}/T}, \quad \tilde{\eta}_{\text{ep}}^2 = \frac{\hbar^2 \varkappa^2}{8\mu T}.$$

Приведем также выражение для контрчлена к выражению (4.133) за счет вклада от двух переключений в лестнице, учтенных при суммировании ряда кольцевых диаграмм (см. [96];  $\varkappa$  — регуляризующий параметр, который в конце всех вычислений следует устремить к нулю):

$$\frac{\Delta \Omega_{\text{ep}}^{(2)}}{V} = -8\sqrt{\pi} \zeta_e \zeta_p \frac{e^2}{\varkappa^2} \sqrt{X} \int_0^\infty e^{-y} \text{arctg} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\eta_{\text{ep}}^2}{y}} \right) dy = -8\sqrt{\pi} \zeta_e \zeta_p \frac{e^2}{\varkappa^2} \sqrt{X} J. \quad (4.134)$$

Здесь  $J$  — интеграл по  $y$ , который равен

$$J = \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \exp \left( \eta_{\text{ep}}^2 / 4 \right) \left[ 1 - \Phi(\eta_{\text{ep}}/2) \right] \right]. \quad (4.135)$$

Трехмерное численное интегрирование дает следующую асимптотику при  $\varkappa \rightarrow 0$  ( $a = e, p$ ):

$$\frac{\delta \Omega_{aa}^{\text{SS}}}{V} - \frac{\delta \Omega_{aa}^{(2)}}{V} \rightarrow -\zeta_a^2 \left\{ \frac{e^6}{T^2} \left[ \frac{\pi}{3} \ln \left( \frac{\varkappa \lambda_{aa}}{2\sqrt{\pi}} \right) - \frac{\pi}{6} (1 - C) \right] + \frac{\lambda_{aa}^3 T}{2} \sigma_Q \left( -\frac{\alpha_a}{2} \right) \right\}, \quad (4.136)$$

где  $\delta \Omega_{aa}^{(2)}$  — часть лестницы с двумя переключателями, уже включенная в дебай-хюккелевском приближении,  $\alpha_a = \sqrt{m_a e^4 / \hbar^2 T}$ .

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Omega_{\text{ep}}^{\text{SS}}}{V} - \frac{\delta \Omega_{\text{ep}}^{(2)}}{V} \rightarrow & 2\zeta_e \zeta_p \left\{ \frac{e^6}{T^2} \left[ \frac{\pi}{3} \ln \left( \frac{\varkappa \lambda_{\text{ep}}}{2\sqrt{\pi}} \right) - \frac{\pi}{6} (1 - C) \right] + \frac{\lambda_{\text{ep}}^3 T}{2} \left[ \sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} - \sigma_Q(\alpha_{\text{ep}}) \right] \right\}, \quad (4.137) \end{aligned}$$

$$\sigma_Q(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{n=4}^{\infty} \frac{\zeta(n-2)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} \alpha^n = - \left( \ln |2\alpha| + \frac{3C}{2} - \frac{4}{3} \right) \frac{2\alpha^3}{3\sqrt{\pi}} + o(|\alpha|^3), \quad \alpha \rightarrow -\infty.$$

В работе [147] второй член в (4.137) содержит ошибочное лишнее слагаемое  $\ln 3$  в скобках  $(-C - 2 \ln 3 + 1)$ .

Суммирование выражений, подобных (4.137) для «р-р», «е-е» и «е-р» взаимодействий с учетом того что  $\zeta_e = \zeta_p$ , приводит к выражению, не зависящему от  $x$  для классической части второго вириального коэффициента:

$$\frac{\delta\Omega^{cl}}{V} = \zeta_e^2 T \left( \frac{e^2}{T} \right)^3 \cdot \frac{\pi}{6} \ln \frac{m_p}{4m_e}. \quad (4.138)$$

Для обменного вклада  $\delta\Omega_{ee}^{exch}$  получаем сходящееся выражение:

$$\frac{\delta\Omega_{ee}^{exch}}{V} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \zeta_e^2 \lambda_{ee}^3 TE(\alpha_{ee}). \quad (4.139)$$

Для  $E(\alpha_{ee})$  можно получить явное выражение ( $\alpha_{ee} = -\alpha_e/2$ ):

$$E(\alpha) = \alpha + \sqrt{\pi} \ln 2 \cdot \alpha^2 + \frac{\pi^2}{9} \alpha^3 + \sum_{n=4}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi} (1 - 2^{2-n})}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} \zeta(n-1) \alpha^n. \quad (4.140)$$

Формула (4.140) соответствует работе [147] для обменного вклада и подтверждается численным интегрированием.

Следует отметить, что выражения для обменного вклада в пределе малых значений параметра альфа переходит в выражение (4.70). Для вырожденных электронов существуют аналогичные выражения для обменного вклада во второй вириальный коэффициент [55]. В работе [148] приводится изящное выражение для обменного вклада, справедливое для произвольной степени вырождения, однако учитывается только первый член борновского ряда по параметру, аналогичному  $\alpha$ , но в котором вместо температуры для вырожденного предела фигурирует химический потенциал, определяющий энергию Ферми [55].

В центре Солнца необходимо учесть релятивистские поправки во вкладе в термодинамические функции от свободного электронного газа, а также давление излучения в «прозрачной» плазме. Используя релятивизм как поправку ( $T/(mc^2) \lesssim 10^{-3}$ ), напомним связь между импульсом и кинетической энергией электрона,

$$P = \sqrt{2mE} \left( 1 + \frac{E}{4mc^2} \right). \quad (4.141)$$

Используя (4.141), получим выражения для активности электронов (ср. с (4.65)):

$$n_e^0(\mu_e) \equiv \zeta_{e,r} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{2}{\lambda_e^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} \left( 1 + \frac{5}{4} \frac{T}{mc^2} x \right)}{\exp(x-y) + 1} dx, \quad (4.142)$$

и давления электронного газа (ср. (4.66)) (индекс  $r$  означает, что учтены релятивистские поправки),

$$P_{0e,r} = \frac{4T}{3\sqrt{\pi}} \frac{2}{\lambda_e^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} \left(1 + \frac{3}{4} \frac{T}{mc^2} x\right)}{\exp(x-y) + 1} dx. \quad (4.143)$$

В (4.142), (4.143), как и раньше,  $x = \varepsilon/T$ ,  $y = \mu_e/T$ .

Аналогично можно найти поправки к энергии и другим функциям электронов. При получении УРС слабонеидеальной плазмы водорода необходимо найти связь активностей (или химических потенциалов) с концентрацией с учетом вырождения электронов

$$n_e + \sum_k n_k = \sum_k (z_k + 1) n_k = - \sum_k' \left( \frac{\partial(\Omega/V)}{\partial \mu_k} \right)_T. \quad (4.144)$$

Термодинамический потенциал  $\Omega$  представлен суммой всех перечисленных выше вкладов. Здесь штрих при суммировании означает, что дифференцировать в (4.144) следует с учетом соотношения (4.68) и выражений типа (4.142), (4.143) для активности и давления электронов. Так, в рамках простейшей модели, в которой кроме вклада идеального газа в УРС учтен дебай-хюккелевский вклад с использованием общих выражений (4.71), (4.72) и условия нейтральности (4.74), получим для простейшего случая  $z_k = 1$

$$2n_e = \zeta_e + \zeta_p + \frac{\Gamma_D}{2} \left( \zeta_p + T^2 \frac{\partial^2 n_e^0}{\partial \mu_e^2} \right). \quad (4.145)$$

Для  $\delta\Omega_{ep}^q$  ответ может быть представлен (ср. (4.101), (4.104)) в виде

$$\frac{\delta\Omega_{ep}^q}{V} = -\zeta_e \zeta_p T \lambda_{ep}^3 \sigma^{ss}, \quad (4.146)$$

$$\sigma^{ss} = \sum_{n=4}^{\infty} \frac{\zeta(n-2)}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \left( \frac{1}{2} - (-1)^n (n-2)^2 \right) \alpha_{ep}^n - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\zeta(2k+1)}{\Gamma\left(k + \frac{5}{2}\right)} \alpha_{ep}^{2k+3}. \quad (4.147)$$

Здесь  $\alpha_{ep} = \sqrt{\beta R \gamma}$ .

Отметим, что полученные аналитические выражения для сходящегося вклада от связанных состояний (4.95), вместе с конечным выражением для вклада от состояний рассеяния (4.146), (4.147) (полученным, строго говоря, путем угадывания и сопоставления с результатами численного интегрирования (4.133) с вычитанием (4.134)), в сумме дают (используя разложение (4.101)) выражения

$$\frac{\delta\Omega_{ep}^q}{V} = \frac{\delta\Omega^{BS}}{V} + \frac{\delta\Omega^{SS}}{V} = -\zeta_e \zeta_p T \lambda_{ep}^3 (\sigma^{BS} + \sigma^{SS}) = -\zeta_e \zeta_p T \lambda_{ep}^3 \sigma^{\text{tot}}. \quad (4.148)$$

Здесь  $\sigma^{\text{tot}}$  — соответствующая сумма по степеням параметра  $\alpha_{ep} = r\sqrt{\beta R \gamma}$ , в точности совпадающая с выражением, приведенным в [69, 71] и полученным из формул типа Бета–Уленбека, записанных для суммарного вклада от

состояний притяжения, без разбиения на связанные состояния и состояния рассеяния

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{n=4}^{\infty} \frac{\zeta(n-2)}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \alpha_{\text{ep}}^n. \quad (4.149)$$

Интересно отметить, что это выражение (4.149) в [69, 71] было получено после отбрасывания расходящихся членов,  $\sim e^2$ ,  $e^4$ ,  $e^6$ , со ссылками на кулоновскую экранировку. В нашем подходе можно получить точное соответствие выражения (4.149) сумме сходящихся вкладов от связанных состояний (не требующих никакого учета экранировки) и состояний рассеяния, вычисленных с помощью трехмерных интегралов (4.133), из которых необходимо вычесть вклад от двух переключателей (4.134), уже учтенных при получении кольцевого приближения, соответствующего приближению Д-Н. При больших значениях параметра  $\alpha_{\text{ep}} \gg 1$  можно оценить сумму в (4.149), заменяя суммирование интегрированием по  $n$  и применяя метод перевала,

$$\sigma^{\text{tot}} \rightarrow \exp(I/T),$$

что соответствует учету только основного состояния в атомной статсумме, как это изначально принималось в формуле Саха. Оценки по этой формуле дают долю связанных состояний («атомов»), равную примерно 30% в центре Солнца (что абсурдно), тогда как согласно формуле Планка–Ларкина эта доля порядка  $10^{-4}$ . Если из (4.149) вычесть вклад связанных состояний, представленный формулой Планка–Ларкина (с  $\sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}}$  (4.60), (4.61), (4.62)), то можно получить аналог вклада от состояний рассеяния (ср. (4.146), (4.147)):

$$(\sigma^{\text{SS}})' = \sigma^{\text{tot}} - \sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}} = -\frac{1}{2} \sum_{n=4}^{\infty} \frac{(-1)^n \zeta(n-2)}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \alpha_{\text{ep}}^n. \quad (4.150)$$

Таким образом, можно установить с учетом (4.103), (4.104) и (4.150) следующие соотношения:

$$\sigma^{\text{SS}} = (\sigma^{\text{SS}})' + \sigma_c, \quad (4.151)$$

$$\sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} = \sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}} - \sigma_c. \quad (4.152)$$

Полный вклад от связанных состояний и состояний рассеяния (4.149) может быть представлен двумя способами

$$\sigma^{\text{tot}} = \sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}} + \sigma^{\text{SS}} = \sigma_{\text{P-L}}^{\text{BS}} + (\sigma^{\text{SS}})'. \quad (4.153)$$

В этом смысле формула Планка–Ларкина является «правильной», но содержащей вклады от связанных состояний и непрерывного спектра, если одновременно должным образом определить вклад от состояний рассеяния. В отличие от формулы Планка–Ларкина  $\sigma_{\text{SRM}}^{\text{BS}}$  описывает вклад только связанных состояний.

Запишем несколько первых членов разложений (4.101), (4.62), (4.147) и (4.150) ( $\delta\Omega/V = -T\zeta_e\zeta_p\lambda_{ep}^3\sigma$ ) по борновскому параметру  $\sim e^2/(\hbar v_T)$

$$\lambda_{ep}^3\sigma_{SRM}^{BS} = \frac{\pi^4}{3} \left(\frac{e^2}{T}\right)^4 \frac{1}{\lambda_{ep}} - \frac{64\pi^2}{15}\zeta(3) \left(\frac{e^2}{T}\right)^5 \frac{1}{\lambda_{ep}^2} + \frac{8\pi^3}{3}\zeta(4) \left(\frac{e^2}{T}\right)^6 \frac{1}{\lambda_{ep}^3} - \dots \quad (4.154)$$

$$\lambda_{ep}^3\sigma_{P-L}^{BS} = \frac{\pi^4}{12} \left(\frac{e^2}{T}\right)^4 \frac{1}{\lambda_{ep}} - \frac{\pi^3}{6}\zeta(4) \left(\frac{e^2}{T}\right)^6 \frac{1}{\lambda_{ep}^3} + \dots \quad (4.155)$$

$$\lambda_{ep}^3\sigma^{SS} = -\frac{7\pi^4}{24} \left(\frac{e^2}{T}\right)^4 \frac{1}{\lambda_{ep}} + \frac{68\pi^2}{15}\zeta(3) \left(\frac{e^2}{T}\right)^5 \frac{1}{\lambda_{ep}^2} - \frac{31\pi^3}{12}\zeta(4) \left(\frac{e^2}{T}\right)^6 \frac{1}{\lambda_{ep}^3} - \dots \quad (4.156)$$

$$\lambda_{ep}^3(\sigma^{SS})' = -\frac{\pi^4}{24} \left(\frac{e^2}{T}\right)^4 \frac{1}{\lambda_{ep}} + \frac{4\pi^2}{15}\zeta(3) \left(\frac{e^2}{T}\right)^5 \frac{1}{\lambda_{ep}^2} - \frac{\pi^3}{12}\zeta(4) \left(\frac{e^2}{T}\right)^6 \frac{1}{\lambda_{ep}^3} - \dots \quad (4.157)$$

К уравнению состояния плазмы (к давлению  $p(\rho, T)$  и другим термодинамическим функциям) следует добавить вклад от равновесного теплового излучения в плазме. В работе [149] приводились выражения для интенсивности излучения в поглощающей среде, из которых следует, что по параметру  $\varepsilon''/\varepsilon' \ll 1$  можно использовать выражение для излучения в прозрачной среде. В центре Солнца, например, в рамках  $S$ -модели [150] параметр  $\bar{k}_\omega c/\bar{\omega} \sim 10^{-6}$ , где  $\bar{k}_\omega$  — средний коэффициент поглощения (непрозрачность),  $c$  — скорость света,  $\bar{\omega}$  — средняя частота теплового излучения.

Напишем выражение для энергии в прозрачной плотной плазме [151] с учетом связи  $k = n\omega/c$ ,  $n$  — показатель преломления плазмы,  $n = \sqrt{1 - \omega_p^2/\omega^2}$ :

$$E_R = 2V \int \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/T) - 1} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{\hbar V}{\pi^2 c^3} \int_{\omega_p}^{\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_p^2)^{1/2} \omega^2}{\exp(\hbar\omega/T) - 1} d\omega. \quad (4.158)$$

Здесь  $V$  — объем системы ( $V \rightarrow \infty$ ),  $\omega_p$  — электронная плазменная частота  $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n_e/m_e$ . В выражении (4.158) учтено, что излучение с частотами  $\omega < \omega_p$  не распространяется в среде как свободное. Разлагая знаменатель в (4.158) по степеням экспоненты  $\exp(-\hbar\omega/T)$ , получим ( $K_n(z)$  — функции Мак-Дональдса [152],  $z = n\hbar\omega_p/T$ )

$$\frac{E_R}{V} = \frac{\hbar\omega_p}{\pi^2 c^3} \frac{T^3}{\hbar^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} [zK_0(z) + 2zK_2(z) + (2 + z^2)K_1(z)]. \quad (4.159)$$

В пределе  $\hbar\omega_p \ll T$  (в центре Солнца  $\hbar\omega_p/T \sim 1/4$ ) из (4.159) получим (ср. [55])

$$\frac{E_R}{V} = \frac{\pi^2 T^4}{15\hbar^3 c^3} \left[ 1 - \frac{5}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar\omega_p}{T}\right)^2 \right]. \quad (4.160)$$

Для свободной энергии излучения аналогично получим

$$\begin{aligned}
 F_R &= \frac{TV}{\pi^2 c^3} \int_{\omega_p}^{\infty} \omega \sqrt{\omega^2 - \omega_p^2} \ln(1 - \exp(-\hbar\omega/T)) d\omega = \\
 &= -\frac{\hbar V}{3\pi^2 c^3} \int_{\omega_p}^{\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_p^2)^{3/2}}{\exp(\hbar\omega/T) - 1} d\omega = -\frac{\hbar V \omega_p^2 T^2}{\pi^2 c^3 \hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} K_2(z).
 \end{aligned} \tag{4.161}$$

Из выражения (4.161) можно получить выражение для давления излучения (с учетом соотношения  $\frac{\partial \omega_p}{\partial V} = -\frac{\omega_p}{2V}$ ):

$$p_R = -\left(\frac{\partial F_R}{\partial V}\right)_T = \frac{\omega_p^2 T^2}{\hbar \pi^2 c^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} K_2(z) + \frac{\omega_p^3 T}{2\pi^2 c^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} K_1(z). \tag{4.162}$$

В пределе  $\hbar\omega_p \ll T$  из (4.162) имеем [55]

$$p_R^0 = \frac{T^4 \pi^2}{45 \hbar^3 c^3}. \tag{4.163}$$

Для нахождения скорости звука вдоль солнечной траектории нам необходимы значения величин  $c_V^R$  — теплоемкости излучения,  $c_V^R = \frac{\partial E_R/V}{\partial T}$ , и производных  $\left(\frac{\partial p_R}{\partial T}\right)_\rho$ ,  $\left(\frac{\partial p_R}{\partial \rho}\right)_T$ . Эти выражения легко получаются из выражений (4.159) и (4.162). Мы не будем здесь приводить соответствующих, достаточно громоздких выражений.

Отметим, что равновесие излучения с веществом предполагает выполнения условия  $\bar{k}\omega R \gg 1$ . На периферии, в фотосфере, это условие уже нарушается [150], так  $\rho \approx 4 \cdot 10^{-9}$  г/см<sup>3</sup>,  $\bar{k} = \kappa\rho = 8 \cdot 10^{-3} \cdot 4 \cdot 10^{-9} = 3,2 \cdot 10^{-11}$  см<sup>-1</sup>,  $R_\odot \approx 7 \cdot 10^{10}$  см,  $\bar{k}R_\odot \approx 2$ .

Отметим некоторые проблемы, требующие решения для дальнейшего прогресса в этой области. В первую очередь, это относится к последовательному выходу за рамки приближения, описывающего УРС до второго вириального коэффициента. Уже учет вкладов в давление от состояний  $H^-$ ,  $H_2^+$ ,  $H_2$  даже для водорода требует выхода за рамки ВВК. Упоминалась ранее проблема описания вклада многоэлектронных состояний в нейтральных и заряженных частицах (HeI, HeII и т. д. по всем другим элементам), а также многочастичных состояний рассеяния. Предпринятые в этом направлении героические усилия [153, 154] нельзя считать закрывающими проблему, так как сам метод [153] учета связанных диаграмм ( $p_{CD}$ , от «connected»), зная вклад простых (simple) неприводимых диаграмм  $p_{SD} = TS(\zeta_k)$  (см. также [69]), состоящий в использовании соотношения

$$p_{CD} = T \sum_k \frac{\zeta_k}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial \zeta_k}\right)^2, \tag{4.164}$$

приводит к неточностям из-за наличия интегрирования по заряду в квантовой термодинамической теории возмущений [123]. Так, беря в качестве  $S(\zeta_k)$  приближение Дебая–Хюккеля,

$$S = \frac{\zeta_D^3}{12\pi}, \quad (4.165)$$

из (4.164) получим

$$P_{CD} = \frac{\pi}{2} T \left( \frac{e^2}{T} \right)^3 \left( \sum_i \zeta_i z_i^4 \right) \left( \sum_j \zeta_j z_j^2 \right), \quad (4.166)$$

что отличается от «правильного» ответа (4.84) коэффициентом, где вместо  $\pi/2$  из-за интегрирования по заряду получается  $\pi/3$  (ср. такую же опisku в [79]).

В то же время подход [153, 154] позволяет хотя бы качественно предсказать, как устроена сходящаяся статистическая сумма многоэлектронного атома. Отметим, что формулы типа Планка–Ларкина или  $\sigma_{SRM}$  расходятся, будучи буквально обобщены, например, на двухэлектронный (гелиеподобный) атом (ион) из-за наличия дважды возбужденных состояний. В пределе большого заряда ядра ( $z \gg 1$ ), когда в главном приближении можно пренебречь электрон–электронным взаимодействием по сравнению с взаимодействием электронов с ядром, получающееся из (4.164) с учетом (ср. (4.95))  $S_{SD} = \zeta_e \zeta_p T \lambda_{ep}^3 \sigma^{BS}$  выражение,

$$p_{CD} = \frac{T}{2} \zeta_p \zeta_e^2 \lambda_{ep}^6 (\sigma_{ep}^{BS})^2 \quad (4.167)$$

представляется, по крайней мере качественно, разумным. Обоснование такого рода выражений требует использования уравнений Фаддеева для задачи трех тел [155].

Приведем также вклады от молекул и взаимодействия заряженных частиц с нейтральными в давление плазмы из работы [156].

Давление молекул водорода можно получить, используя приближение «гармонического осциллятора – жесткого ротатора» [55],

$$p_m = T \zeta_m, \quad \zeta_m = \left( \frac{\zeta_a}{\sigma_{BS}} \right)^2 \lambda_{aa}^3 \sigma_m, \quad \zeta_a = p_{BS}/T, \quad (4.168)$$

и статсумма для молекул  $\sigma_m$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma_m = \sum_{n_1, n_2, J, v} n_1^2 F_{SRM}(\beta I_{n_1}) e^{\beta I_{n_1}} n_2^2 F_{SRM}(\beta I_{n_2}) e^{\beta I_{n_2}} \times \\ \times \left\{ \exp \left( \beta \left( D_{n_1, n_2} - \hbar \omega_{n_1, n_2} v - \frac{\hbar^2 J^2}{2 I_{n_1, n_2}} \right) \right) - 1 \right\}, \quad (4.169) \end{aligned}$$

где суммирование выполняется по атомным состояниям с главными квантовыми числами  $n_1$ ,  $n_2$ , колебательных ( $v$ ) и вращательных ( $J$ ) состояний.  $I_{n_1}$ ,  $I_{n_2}$  — энергии ионизации этих атомных состояний,  $D_{n_1, n_2}$  — энергия диссо-

циации соответствующей молекулы,  $I_{n_1, n_2}$  — момент инерции,  $\beta = T^{-1}$ . Для наших приложений использовалось упрощенное выражение как произведение статусум по колебательным и вращательным состояниям:

$$\frac{\sigma_m}{\sigma_{BS}^2} = \sigma_r \sigma_v = \frac{T}{B_r} \left( \frac{e^{D/T} - 1}{1 - e^{-\hbar\omega/T}} - \frac{D}{\hbar\omega} - \frac{D^2}{2\hbar\omega T} \right), \quad (4.170)$$

где  $D = D_{1,1} \approx 4,52$  эВ — энергия диссоциации молекулы водорода,  $B_r = \hbar^2/2I_{1,1} \approx 0,00736$  эВ — характеристическая вращательная энергия,  $\hbar\omega = \hbar\omega_{1,1} \approx 0,546$  эВ — характеристическая колебательная энергия.

Поправки на взаимодействие заряженных и нейтральных частиц вводятся в следующей простой форме:

$$p_{en} = c_{en} \zeta_e \zeta_n, \quad p_{p,pn} = c_{p,pn} \zeta_p \zeta_n, \quad (n = a, m), \quad (4.171)$$

где индекс  $p$  означает учет поляризации атомов и молекул заряженными частицами и

$$c_{en} = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu_{en}} l_{0,n}, \quad c_{p,pn} = 2\pi e^2 \alpha_n / r_0, \quad (4.172)$$

где  $l_{0,n}$  — длина рассеяния для частицы  $n$ :  $l_{0,a} = 3,125a_0$ ,  $l_{0,m} = 1,6a_0$ ,  $\alpha_a = 6,67 \cdot 10^{-25}$ ,  $\alpha_m = 8,17 \cdot 10^{-25}$  и  $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ ,  $r_0 = e^2/I$ , здесь  $I$  — потенциал ионизации нейтральной компоненты.

В уравнении состояния низкотемпературной водородной плазмы необходимо учитывать также два типа ионов водорода — отрицательный (или атомарный) ион  $H^- = (e, e)$  и молекулярный ион  $H_2^+ = (e, p)$ . (Для общности используем обозначения 'ae' и 'ap' соответственно.) Вклады в давление для этих ионов вычисляются следующим образом:

$$p_{ac} = T \zeta_{ac}, \quad \zeta_{ac} = \zeta_a \zeta_c \chi_{ac}^3 \sigma_{ac}, \quad \sigma_{ac} = e^{I_{ac}/T} - 1, \quad (4.173)$$

где  $c = e, p$  и  $I_{ae} \approx 0,75$  эВ,  $I_{ap} \approx 2,69$  эВ.

С использованием соотношений (4.64), (4.71), (4.83), (4.84), (4.138), (4.106), (4.146)–(4.147), (4.136)–(4.137), (4.139)–(4.140), (4.162), (4.168), (4.171)–(4.172), (4.173) рассчитывалось уравнение состояния слабо-неидеальной плазмы водорода, то есть зависимость суммарного давления  $p(T)$  вдоль солнечной траектории в рамках S-модели [150].

Расчеты, учитывающие все перечисленные выше вклады, относятся к физической картине, представленной согласно термодинамической теории возмущений с точностью до ВВК (вплоть до  $\zeta^2$ ) для водородной плазмы.

На рис. 4.6 представлены парциальные вклады в суммарное давление от различных составляющих  $\delta p/p_{tot}$  в температурной шкале. Видно, что вклад от давления электронов и протонов, составляющий значение  $\approx 1$  в температурных координатах, резко падает на периферии до  $\sim 10^{-5}$ , где преобладают связанные состояния (атомы), вклад которых в центре Солнца, как и e-p состояний рассеяния  $\sim 10^{-4}$ . Вклад кулоновского взаимодействия  $\sim 10^{-2}$  в центре Солнца, достигает максимума  $\sim 10^{-1}$  при  $T \sim 5 \cdot 10^4$  К, и убывает на периферии до  $10^{-9}$ . Дифракционные поправки  $\sim 10^{-3}$  в центре Солнца, проходят через максимум  $\sim 4 \cdot 10^{-3}$  при  $T \sim 5 \cdot 10^4$  К и далее, как и все

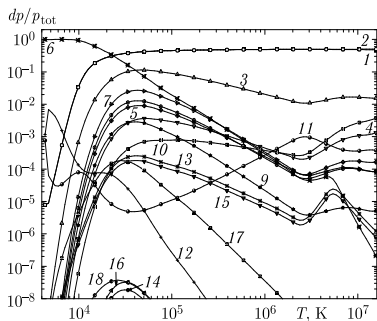


Рис. 4.6. Удельные вклады ( $\delta p/p_{\text{tot}}$ ) в суммарное давление в зависимости от температуры вдоль солнечной кривой от составляющих: 1 —  $p_{0,i}$ ; 2 —  $p_{0,er}$ ; 3 —  $\delta p_{D,H}$ ; 4 —  $\Delta\Omega_{\text{dif}}/V$ ; 5 —  $\delta\Omega^{\text{cl}}/V$ ; 6 —  $\delta p_{\text{BS,ed}}$ ; 7 —  $\delta\Omega_{\text{ep}}^q/V$ ; 8 —  $-\delta\Omega_{\text{qp}}^q/V$ ; 9 —  $-\delta\Omega_{\text{exch}}^q/V$ ; 10 —  $-\delta\Omega_{\text{exch}}^{\text{ch}}/V$ ; 11 —  $p_R$ ; 12 —  $p_m$ ; 13 —  $-p_{\text{ea}}$ ; 14 —  $-p_{\text{em}}$ ; 15 —  $p_{p,pa}$ ; 16 —  $p_{p,pm}$ ; 17 —  $p_{\text{ae}}$ ; 18 —  $p_{\text{ap}}$

взаимодействия, связанные с заряженными частицами (от суммарного логарифма, состояний рассеяния от  $e$ - $p$ ,  $p$ - $p$ ,  $e$ - $e$  взаимодействий, обменного  $e$ - $e$  взаимодействия), резко падают на периферии.

В центре Солнца относительный вклад от суммарного логарифмического члена  $\approx 2 \cdot 10^{-4}$  (соответственно, поправка на экранировку «одетыми» частицами еще на порядок меньше).

Вклад обменного взаимодействия равен примерно  $4 \cdot 10^{-3}$  в центре Солнца, он — следующее по значимости после кулоновского вклада. Доля давления излучения  $\approx 4 \cdot 10^{-4}$  в центре Солнца. Вклад от  $p$ - $p$  состояний рассеяния здесь же  $\approx 10^{-4}$ . Наименьший вклад  $\approx 4 \cdot 10^{-6}$  от  $e$ - $e$  состояний рассеяния.

Видно также, что многие поправки, входящие в ВВК, вполне существенны, учитывая высокую точность процедуры инверсии в задачах гелиосейсмологии.

Следует еще раз оговориться, что здесь рассмотрен лишь вклад от водородной плазмы в предположении (заведомо неверном, особенно вблизи центра, из-за наличия He и других элементов), что именно водородом определяется полная плотность вещества. При всей условности этой модели, цель данных расчетов состояла в качественном выяснении относительной доли различных вкладов в суммарное давление плазмы. В то же время точность такой модели в обычном, не прецизионном, как в гелиосейсмологии, смысле вполне разумна при сравнении с данными полной S-модели, включающей He и другие элементы, распределенные вдоль солнечной траектории.

#### 4.6. Модель ограниченного атома

При проведении термодинамических расчетов разреженных высокотемпературных газов и плазмы атомы обычно считаются идеальной подсистемой, не взаимодействующей с окружающей средой. Соответственно предполагается, что энергетический спектр связанных состояний идентичен спектру изолированных частиц, а влияние неидеальности на связанные состояния в рамках химической модели выражается в снижении потенциала ионизации, сдвиге

уровней и ограничении числа верхних возбужденных уровней при вычислении статсумм.

При увеличении давления межатомное взаимодействие начинает заметно проявляться при нарушении условия

$$n_{ат} b_0^3 \ll 1, \quad (4.174)$$

где  $b_0 \sim \alpha_0$  — радиус атома в основном состоянии. Однако при высоких давлениях и температурах, сравнимых с потенциалом ионизации, появляется значительное количество возбужденных атомов. Размер последних может заметно превышать  $b_0$  и поэтому неизолированность и, в частности, то обстоятельство, что объем, доступный для реализации состояний атома, конечен, сказывается на них в первую очередь. Влияние этого эффекта было продемонстрировано в работе [157], где были проведены расчеты для водорода в приближении ограниченного атома. Этому приближению соответствует потенциал вида

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r}, & 0 < r < r_c \\ \infty, & r_c \leq r \end{cases}. \quad (4.175)$$

Результаты расчетов энергии и возбужденных состояний атома водорода показали, что зависимость энергии возбужденного состояния от конечности атомного объема резко возрастает с увеличением главного квантового числа. Применяя численные методы расчета атомных структур, удается оценить влияние сжатия атомной ячейки на энергетический спектр многоэлектронных атомов, таких как аргон и цезий. Для этого был использован метод Хартри–Фока (см. гл. 3) [158–160], который, в нашем случае, сводится к конечно-разностному решению [161] интегро-дифференциальных уравнений,

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + V_{nl}(r) - \varepsilon_{nl} \right] f_{nl}(r) + \int_0^{r_c} X_{nl}(r, s) f_{nl}(s) ds = 0, \quad (4.176)$$

относительно радиальных частей  $f_{nl}$  одноэлектронных функций:

$$\psi_{nlms}(r, \theta, \varphi, \delta) = \frac{f_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_s(\delta), \quad (4.177)$$

которые подчиняются условиям нормировки,

$$\int_0^{r_c} f_{nl}(r) f_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'}, \quad (4.178)$$

и граничным условиям,

$$f_{nl}(0) = 0, \quad f_{nl}(r_c) = 0, \quad (4.179)$$

что очевидно соответствует уравнению (4.175) внутриатомного потенциала. Систему уравнений (4.176)–(4.178) необходимо решать для всех электронных термов, которые возможны в приближении  $LS$ -связи. Для адекватного описания электронной структуры многоэлектронных атомов необходимо учитывать эффекты межэлектронной корреляции, что для наших целей можно сделать

в рамках простейшего приближения [162]. Рисунки 4.7 и 4.8 иллюстрируют проведенные расчеты для атомов аргона и цезия, где представлены схемы уровней основного и возбужденных состояний в зависимости от радиуса ячейки.

Расчеты показывают, что если основное состояние щелочных металлов начинает чувствовать сжатие при относительно больших радиусах (для цезия это примерно  $12a_0$ ) ячейки, то у атомов инертных газов, вследствие компакт-

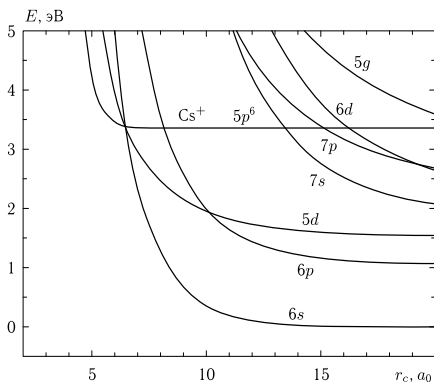


Рис. 4.7. Результаты расчета спектра цезия по модели ограниченного атома

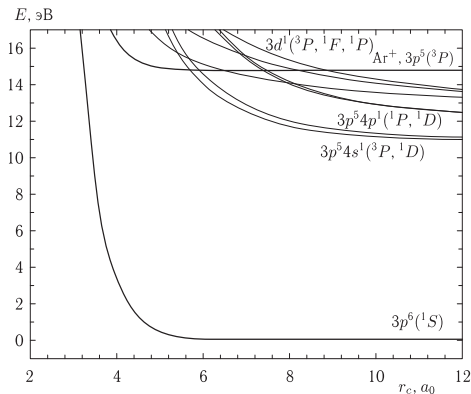


Рис. 4.8. Результаты расчета спектра аргона по модели ограниченного атома

ности электронной структуры их основного состояния, энергия их низшего уровня начинает заметно возрастать при гораздо меньших радиусах. У аргона энергия основного состояния при  $5,5a_0$  не сдвигается заметно, в то время как энергия первого возбужденного состояния (внешний электрон в состоянии  $4s$ ) превышает ионизационный предел. Рассмотренные примеры показывают, что, несмотря на различие в поведении спектров сжатых атомов, имеется общая закономерность, а именно, что существует диапазон радиусов атомной ячейки, где возрастает энергетическая щель между основным и возбужденными состояниями по сравнению с изолированными атомами.

Влияние эффекта конечного объема на атомный спектр возбуждений может существенным образом сказываться на термодинамических свойствах плазмы. Следует отметить, что, например, при давлении в 100 бар и температуре 5000 К среднее межчастичное расстояние составляет величину порядка  $20a_0$ , что лишь в 2–3 раза превышает «характерный размер» основного состояния атома щелочного металла и практически совпадает с размером его первых возбужденных состояний.

Таким образом, по крайней мере, для описания движения внешних электронов, внутриаомный потенциал должен быть эффективно видоизменен, чтобы учесть наличие окружающей атом плазмы. Воспользуемся приближением ограниченного атома, чтобы выяснить, насколько существенно деформация энергетического спектра атома за счет взаимодействия с частицами сказывается на суммарных термодинамических характеристиках неидеальной плазмы.

Рассмотрим простейший случай трехкомпонентной газовой системы, состоящей из атомов, электронов и однозарядных ионов. Предположим, что атомы имеют форму сфер с радиусом, зависящим от температуры и плотности, а размерами ионов и электронов будем пренебрегать. Подсистему атомов, имеющих конечный размер, будем представлять себе как систему твердых шаров не взаимодействующих, когда расстояние между ними превышает  $2r_c$ . Свободная энергия такой модельной системы может быть записана в виде

$$F(\{N_j\}, V, T) = F_{\text{id}}(\{N_j\}, V, T) + \Delta F_{\text{HS}}(\{N_j\}, V, T) + \Delta F_{\text{Coul}}(\{N_j\}, V, T). \quad (4.180)$$

Первое слагаемое представляет собой свободную энергию идеальнoгазoвoй электрoнейтральной системы атомов, электронов и ионов,

$$F_{\text{id}} = -k_{\text{B}}T \left[ N_{\text{a}} \ln \frac{\sigma(r_{\text{c}})}{n_{\text{a}} \Lambda_{\text{a}}^3} + N_{\text{e}} \ln \frac{2\sigma}{n_{\text{e}}^2 \Lambda_{\text{i}}^3 \Lambda_{\text{e}}^3} + (N_{\text{a}} + 2N_{\text{e}}) \right], \quad (4.181)$$

с тем отличием, что статсумма атома в соответствии с граничным условием ограниченного атома (4.179) зависит от его радиуса. Второе слагаемое в (4.180) является вкладом отталкивания твердых сфер, также зависящим от радиуса  $r_c$  через безразмерный параметр упаковки  $\eta = n_{\text{a}}(4\pi r_{\text{c}}^3/3)$ :

$$\Delta F_{\text{HS}} = N_{\text{a}} k_{\text{B}} T f(\eta). \quad (4.182)$$

Для описания этого вклада воспользуемся выражением из работы [163]

$$f(\eta) = \eta \frac{4 - 3\eta}{(1 - \eta)^2}. \quad (4.183)$$

Этому выражению соответствуют поправки к давлению,

$$\frac{\Delta p_{HS}}{n_a k_B T} = \frac{2 - \eta}{(1 - \eta)^3} = \eta f'(\eta), \quad (4.184)$$

и химическому потенциалу,

$$\frac{\Delta \mu_{HS}}{k_B T} = \eta \frac{3\eta^2 - 9\eta + 8}{(1 - \eta)^3} = f(\eta) + \eta f'(\eta). \quad (4.185)$$

Статсумма  $\sigma_a(r_c)$  получена суммированием вкладов уровней энергии, вычисленных в приближении ограниченного атома методом Хартри–Фока. Отметим, что поправка  $\Delta p_{HS}$ , как и статсумма  $\sigma_a(r_c)$  являются монотонно возрастающими функциями радиуса атома  $r_c$ , вследствие чего зависимость свободной энергии (4.180) от радиуса атомной ячейки имеет минимум. Значение  $r_c$ , при котором оно достигается, является равновесным радиусом атомов и может быть определено из вариационного принципа статистической механики [55]:

$$\frac{\partial F}{\partial r_c} = 0. \quad (4.186)$$

Выполняя дифференцирование свободной энергии (4.180) получим систему уравнений равновесия:

$$k_B T [n_a + 2n_e + n_a \eta f'(\eta)] + \Delta p_{Coul} = P_0; \quad (4.187)$$

$$r_c \frac{1}{\sigma_a} \frac{\partial \sigma_a}{\partial r_c} = 3\eta f'(\eta); \quad (4.188)$$

$$\frac{n_a}{n_e^2} = \frac{\sigma_a(r) \Lambda_e^3}{2\sigma_i} \exp \left[ -f(\eta) - \eta f'(\eta) + \frac{2\Delta \mu_{eCoul}}{k_B T} \right]. \quad (4.189)$$

Решая эту систему трансцендентных уравнений относительно  $n_a$ ,  $n_e$  и  $r_c$  при помощи изложенных выше методов (п. 4.6), можно затем найти все термодинамические функции.

Заметим, что равновесное значение радиуса атома зависит от давления и температуры. Эта зависимость является индивидуальной для каждого вещества и определяется видом спектра связанных состояний. Равновесное значение радиуса убывает с ростом давления при постоянной температуре, а при разрежении, сопровождаемом монотонным увеличением радиуса, уравнение состояния приближается к уравнению состояния идеального газа

## 4.7. Термодинамические расчеты

Одним из важных приложений изложенных выше методов являются расчеты в рамках химической модели плазмы сложного состава в области умеренных плотностей и температур. Такие системы обычно содержат самые различные сорта частиц, а диапазон параметров простирается от газа, состоящего из многоатомных молекул до плазмы с развитой ионизацией и заметной кулоновской неидеальностью. Результаты некоторых расчетов и их обсуждение для этой области параметров содержатся, в частности, в работе [18].

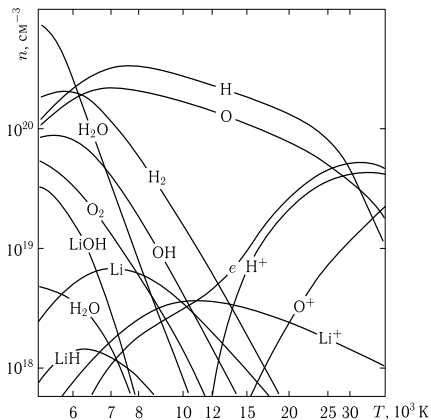


Рис. 4.9. Состав плазмы, состоящей из смеси 97 % воды и 3 % лития при 100 МПа

Пример такого рода расчетов приведен на рис. 4.9, где представлен состав плазмы, представляющей смесь воды и лития.

У нижней границы температурного диапазона смесь представляет собой идеальный газ молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{LiOH}$ , атомов  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ , а у верхней — это частично ионизованная плазма с развитой кулоновской неидеальностью, состоящая из ионов  $\text{H}^+$ ,  $\text{O}^+$ ,  $\text{Li}^+$ , электронов и атомов водорода и кислорода.

Данные по ударно-сжатым цезию [164, 165] и инертным газам [166–168] являются наиболее детальными, поэтому используем их для количественного сравнения с данными расчетов, полученных при помощи изложенных выше методов. Наиболее точные данные по цезию, полученные на ударной трубе [164] охватывают область по температурам от 2600 К до 20 000 К и давлениям от 0,2 до 20 МПа. Химическая модель позволяет в целом правильно, с расхождением не более 20 %, как по термическому, так и калорическому уравнению состояния, описать экспериментальные данные. Однако существующее расхождение химической модели с экспериментами в калорическом уравнении состояния, выходящее за пределы экспериментальной погрешности, не удастся ликвидировать в рамках традиционных подходов, выбирая какую-либо из кулоновских поправок на неидеальность и известные способы расчета статсумм, вычисленных по уровням энергии изолированного атома. В то же время неожиданно хорошим оказалась совпадение с экспериментом расчетов по идеальногогазовому приближению со статсуммой, равной  $g_0$  (статвес основного состояния), не имеющему никакого корректного обоснования. Тем не менее такое совпадение позволило в экспериментальных работах [164, 165] сделать предположение о появлении в системе дополнительного отталкивания, не учитываемого традиционными подходами [169],

и резком уменьшении вклада дискретного спектра, связанного с деформацией энергетических уровней при высоких плотностях. Аналогичное поведение термодинамических величин было выявлено и в экспериментах по инертным газам и, в частности, по аргону [166–168], где температуры достигали 30 000 К, а плотности — около критических значений.

Расчеты методом Хартри–Фока в приближении ограниченного атома, приведенные выше, показали большую чувствительность атома цезия к сжатию, а отсюда можно предположить, что эффект деформации дискретного спектра должен проявляться на цезии при меньших плотностях, чем на аргоне. Именно так и обстоит дело в действительности.

Вышеуказанные отличия традиционных расчетов от экспериментальных данных проявляются в Cs при межчастичном расстоянии  $20a_0$ , а в аргоне при расстояниях менее  $10a_0$ . Расчеты, проведенные с применением модели ограниченного атома, описанной выше, показывают, что эффекты деформации спектра в первую очередь проявляются в той области, где заметна доля атомов. Это отчетливо видно на примере Cs (рис. 4.10, 4.11).

Использование данной модели заметно улучшает согласие с результатами в нижней части достигнутого в эксперименте температурного диапазона, где степень ионизации невелика. В области развитой ионизации необходимо более детально рассматривать кулоновские поправки.

Расчеты, проведенные с использованием модели (4.177)–(4.184) в сочетании с приближением [171] для описания кулоновской неидеальности, позволили удовлетворительно описать эксперимент во всей исследованной области [164, 165]. Кроме согласия в калорическом уравнении состояния

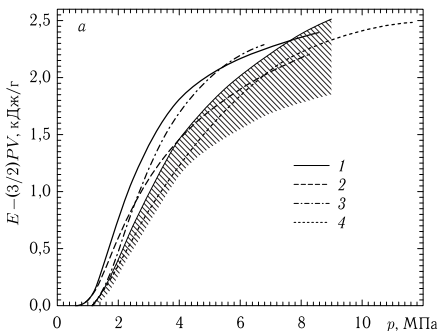


Рис. 4.10. Калорическое уравнение состояния цезия на изохоре  $V = 200 \text{ см}^3/\text{г}$ : Затенена полоса (5%) для сглаженной экспериментальной зависимости  $H(P, V)$  [164]; 1 — расчет в приближении [170], атомы-идеальная подсистема; 2 — расчет в приближении [171] для взаимодействия зарядов; 3 — модель ограниченного атома с приближением [170] для заряженных частиц; 4 — расчет в приближении ограниченного атома с приближением [171] для заряженной подсистемы

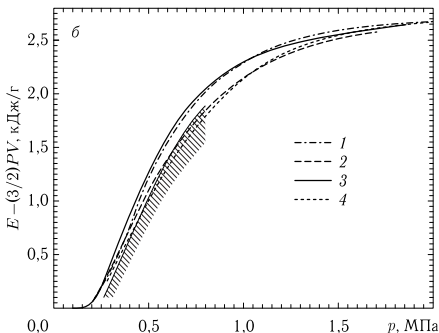


Рис. 4.11. Калорическое уравнение состояния цезия на изохоре  $V = 1000 \text{ см}^3/\text{г}$ . Пояснения к условным обозначениям смотрите на рис. 4.10

модель ограниченного атома с дополнительным учетом кулоновских поправок позволяет добиться удовлетворительного согласия и в термическом уравнении состояния (рис. 4.12). Отметим, что отличительной особенностью как модели ограниченного атома, так и приближения [171] по сравнению с традиционным расчетом плазмы является наличие эффективного межчастичного отталкивания.

Сходные выводы о значительной роли межчастичного отталкивания следуют также из экспериментов по ударно-волновому сжатию плазмы аргона [168], где были выполнены кинографические и температурные измерения, — рис. 4.13, 4.14, 4.15, 4.16, 4.17.

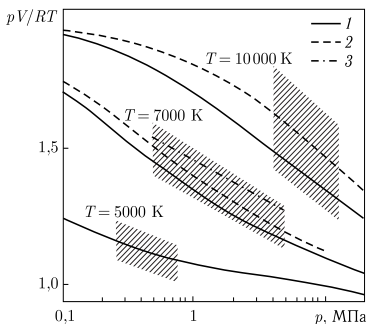


Рис. 4.12. Термическое уравнение состояния плазмы цезия. Заштрихована полоса экспериментальной ошибки [164]. Обозначения см. на рис. 4.10

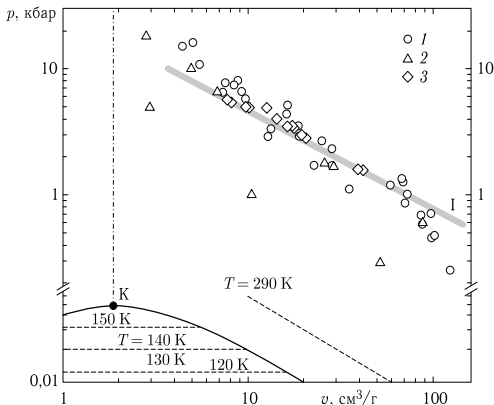


Рис. 4.13. Фазовая диаграмма аргона [168]. Отмечены границы двухфазной области, критическая точка К. 1 — экспериментальные данные [168], 2 — данные работы [167], скорректированные с учетом уравнения состояния реального газа [172] перед фронтом ударной волны, 3 — [166], пунктир — изотерма [172], штрих-пунктир — изохора  $v = v_{кр}$ . Серая линия — граница однократной ионизации I ( $\chi_{Ar+} = \chi_{Ar}$ ,  $\chi_{Ar} = N_{Ar}/N_{total}$ )

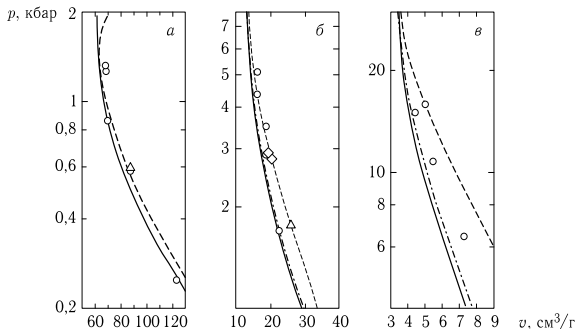


Рис. 4.14. Сравнение экспериментальных ударных адиабат аргона с результатами модельных расчетов. Сплошные кривые — учет взаимодействия заряженных частиц в кольцевом (дебаевском) приближении в большом каноническом ансамбле [104, 173], штрих-пунктирная — дополнительный учет взаимодействия атомов в приближении второго вириального коэффициента [174], пунктирные линии — расчет с использованием модели «ограниченного атома» [6, 168, 175]: а)  $p_0 = 1$  атм; б)  $p_0 = 5$  атм; в)  $p_0 = 20$  атм

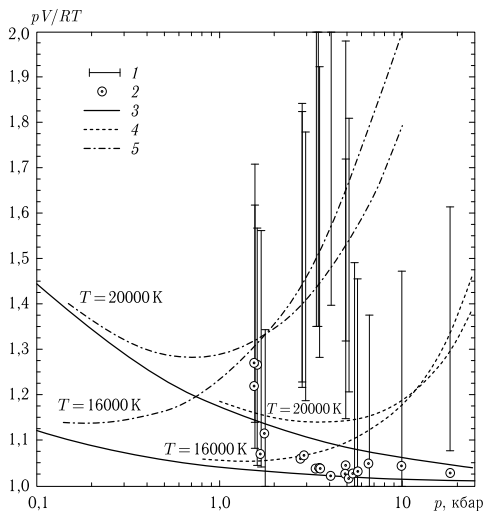


Рис. 4.15. Термическое уравнение состояния плазмы аргона:  $p = 1 \div 20$  кбар;  $T = 5000 \div 23000$  К [175]. 1 — результаты эксперимента [166, 167]; 2 — расчет в кольцевом (дебаевском) приближении в большом каноническом ансамбле [104, 173] для заряженных частиц для каждой экспериментальной точки  $p_{\text{эксп}}, T_{\text{эксп}}$ ; 3, 4, 5 — расчетные изотермы 16000 К и 20000 К в приближениях: 3 — расчет с использованием псевдопотенциальной модели [171] (глубина псевдопотенциала и граница внутриатомных состояний приняты равными  $-k_B T$ ); 4 — с дополнительным учетом второго и третьего вириального коэффициентов аргона [174]; 5 — расчет по модели «ограниченного атома» [168, 175]

Рассмотрим термодинамику аргона при значительно более высоких параметрах. Изложенные методы позволяют использовать различные модели плазмы, принимая во внимание всевозможные плазменные эффекты. На этом основаны попытки распространить химическую модель плазмы за пределы области ее традиционного применения и, в частности, на область ультравысоких давлений и температур [176, 177]. Для этого оказалось необходимо учесть такие термодинамические эффекты, как многократная ионизация, электронное возбуждение, кулоновское взаимодействие между заряженными частицами, короткодействующее отталкивание атомов и ионов, вырождение электронов. Такие состояния были реализованы в экспериментах по сверхмощному ударному сжатию пористых образцов меди [178, 179] (температуры до  $5 \cdot 10^5$  К, давления до 20 Мбар, удельные плотности энергии до 75 МДж/г), и алюминия [180, 181] (температуры до  $7 \cdot 10^6$  К, давления до 400 ТПа, удельные плотности энергии до 60 МДж/г).

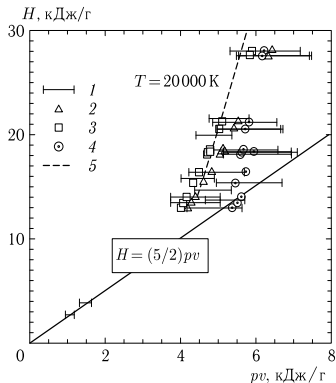


Рис. 4.16. Калорическое уравнение состояния плазмы аргона [175]. 1 — результаты эксперимента [166, 167]; 2, 3, 4 — расчет для каждой экспериментальной точки  $v(p_{\text{exp}}, H_{\text{exp}})$ ; приближения: 2 — по псевдопотенциальной модели [171] (глубина псевдопотенциала и граница внутриатомных состояний приняты равными —  $k_B T$ ); 3 — кольцевое (дебаевское) приближение в большом каноническом ансамбле [104, 173] для заряженных частиц; 4 — модель «ограниченного атома» [168, 175]; 5 — расчетная изотерма  $T = 20000$  К по псевдопотенциальной модели [171];

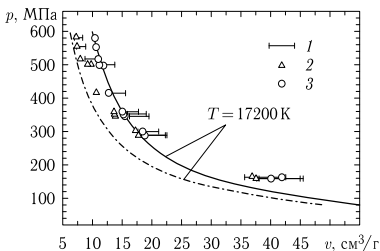


Рис. 4.17. Термическое уравнение состояния ударно-сжатого аргона 1 — результаты эксперимента [166]; 2, 3 — расчет для каждой экспериментальной точки  $v(p_{\text{exp}}, T_{\text{exp}})$ ; приближения: 2 — кольцевое (дебаевское) приближение в большом каноническом ансамбле [170] для заряженных частиц; 3 — расчет в приближении ограниченного атома с приближением [170] для заряженной подсистемы. Штрихпунктирная и сплошная кривые — расчет изотермы в приближениях 2 и 3, соответственно

В соответствии с химической моделью плазма состояла из атомов электронов и ионов. Атомы и ионы рассматривались как больцмановские частицы

с радиусами  $r_i$ . Свободная энергия такой системы представляла собой сумму,

$$F \equiv F_{\text{id}}^e + F_{\text{id}}^i + F_{\text{Coul}} + F_{\text{HS}}. \quad (4.190)$$

Первое слагаемое — вклад идеального вырожденного электронного газа:

$$F_{\text{id}}^e = n_e k_B T \left[ \alpha_e - \frac{I_{3/2}(\alpha_e)}{I_{1/2}(\alpha_e)} \right], \quad (4.191)$$

где  $I$  — функции Ферми–Дирака, а безразмерный химический потенциал  $\alpha = \mu/k_B T$  определялся из соотношения  $I_{1/2}(\alpha_e) = n_e \Lambda_e^3/2$ . Вклад идеального газа тяжелых частиц представлен вторым слагаемым:

$$F_{\text{id}}^i = \sum_j N_j k_B T \left( \ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right). \quad (4.192)$$

В (4.192) статсуммы определялись выражением [182]

$$\sigma_j = \sum_n q_n^j \left[ \exp \left( \frac{E_n^j}{k_B T} \right) - 1 + \frac{E_n^j}{k_B T} \right]. \quad (4.193)$$

Кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле [170], обобщенного на случай многократной ионизации:

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{V k_B T} &\equiv \frac{F - \sum N_j \mu_j}{V k_B T} \equiv \frac{p}{k_B T} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} - \frac{\tilde{\mathcal{Z}}_D^3}{24\pi} = \\ &= \sum_{\alpha} \left[ n_{\alpha} - \frac{\tilde{\Gamma}_D}{6} \frac{n_{\alpha} z_{\alpha}^2}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D/2} \right], \end{aligned} \quad (4.194)$$

где суммирование осуществляется по всем заряженным частицам, а параметр  $\tilde{\Gamma}_D$  определяется, как корень уравнения

$$\tilde{\Gamma}_D^2 = \left( \frac{e^2}{k_B T \tilde{r}_D} \right) = 4\pi \left( \frac{e^2}{k_B T} \right)^3 \sum_{\alpha} \frac{n_{\alpha} z_{\alpha}^2}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}_D/2}. \quad (4.195)$$

Короткодействующее отталкивание атомов и ионов, описывалось в приближении твердых сфер (4.182)–(4.185). Эффективные радиусы  $r_c$  оценивались из предварительно проведенных расчетов методом Хартри–Фока для атомов и ионов меди и алюминия. Для меди эти радиусы выбирались одинаковыми для всех ионов,  $r_i = r_c = 1,75a_0$ , что примерно соответствовало радиусу пятикратного иона  $\text{Cu}^{5+}$ . Для алюминия средний для всех ионов радиус определялся из соотношения

$$r_c = \frac{\sum_{i=1}^L n_i r_i}{\sum_{j=2}^L n_j}, \quad (4.196)$$

а радиусы ионов алюминия выбирались начиная с  $2,5a_0$  для атома до 0 для тринадцатикратного иона  $Al^{13+}$  в соответствии с результатами расчета их структуры методом Хартри–Фока. Зависимость  $r_c$  от плотности определяла соответствующий вид конфигурационной части химического потенциала,

$$\frac{\mu_i^{HS}}{k_B T} = f_{HS}(\eta) + \eta f'_{HS}(\eta) \left[ \frac{3(r_i - r_c)}{r_c} + 1 \right], \quad (4.197)$$

что приводило к увеличению степени ионизации по сравнению со случаем одинаковых значений радиуса для всех частиц,  $r_i = r_c = \text{const}$ .

На рис. 4.18 *a, б* приведено сравнение расчета ударных адиабат меди с экспериментальными данными [178, 179] и расчетами методом Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками [183].

Расчеты позволили определить, какая из модификаций химической модели наиболее существенно влияет на результаты. Как и ожидалось, наиболее существенным является учет короткодействующего отталкивания между ионами, в отсутствие которого расчетные плотности значительно меньше измеренных значений. Менее радикальным, хотя и существенным, является учет кулоновской неидеальности [170] и вклада возбужденных состояний, что и в том и в другом случае приводит к увеличению расчетной плотности ударного сжатия. Наконец, наименее заметно влияет на положение ударной адиабаты учет вырождения электронов. Подобный расчет проведен и для

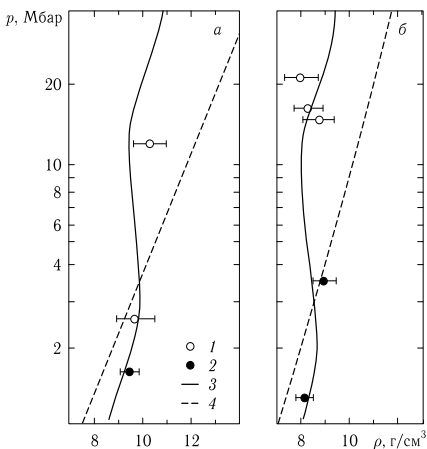


Рис. 4.18. Сжатие пористой меди при  $m = \rho_{00}/\rho_0 = 3$  (а) и  $m = 4$  (б) интенсивными ударными волнами. 1 — эксперимент [178]; 2 — эксперимент [179]; 3 — модель Томаса–Ферми [183]; 4 — данная модель (4.190)–(4.197)

Таблица 4.1. Термодинамические характеристики экстремально сжатой плазмы железа ( $\rho_0 = 8,88 \text{ г/см}^3$ ;  $m = 1$ ), рассчитанные с использованием модифицированного варианта псевдопотенциальной модели [184]:  $p$ ,  $\rho$ ,  $H$ ,  $S$  — давление, температура, удельная энтальпия и энтропия никеля,  $a$  — скорость звука,  $\alpha$  — суммарная степень ионизации плазмы,  $\Gamma_D \equiv e^2/k_B T R_D$  — параметр неидеальности,  $\lambda_e \equiv h^2/2\pi m_e k_B T$  — тепловая длина волны де-Бройля

$p$ , ГПа	$T$ , $10^3$ К	$H$ , кДж	$S$ , Дж/(г·К)	$a$ , км/с	$\alpha \equiv n_e/(\sum n_j)$	$\Gamma_D$	$n_e \lambda_e^3$
$10^3$	37	89,2	2,480	13,1	1,7	48	21
$3 \cdot 10^3$	$10^9$	258	3,687	17,4	2,8	11	6,9
$10^4$	350	828	4,887	28	4,3	3,0	2,3
$5 \cdot 10^4$	1440	4028	7,311	55,8	6,7	0,6	0,5

ударно-сжатого алюминия, что иллюстрирует рис. 4.19, на котором наряду с экспериментом представлены данные, полученные по другим моделям.

Попытки экстраполяции химической модели на область экстремальных сжатий — т.е. ультравысоких давлений и температур предпринимались помимо алюминия также и для плазмы железа [184] и никеля [191]. В случае

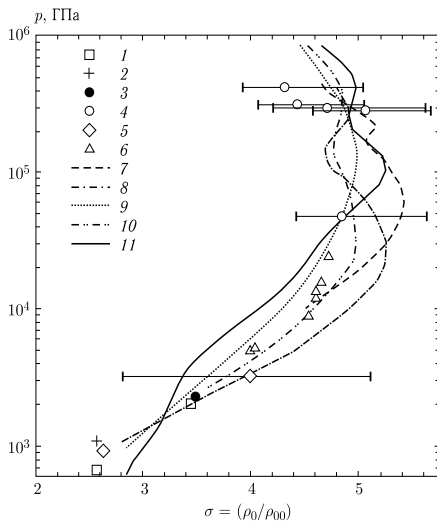


Рис. 4.19. Ударные адиабаты ( $m = 1,0$ ). 1–6 экспериментальные данные: 1 — [32], 2 — [63], 3 — [67], 4 — [117], 5 — [181], 6 — [180]; 7–11 — результаты вычислений: 7 — модель INFERNO [185]; 8 — МХВС [186], 9 — ТФП [183], 10 — ССП [24], 11 — вычисления в рамках химической модели согласно приближению (4.223)–(4.231)

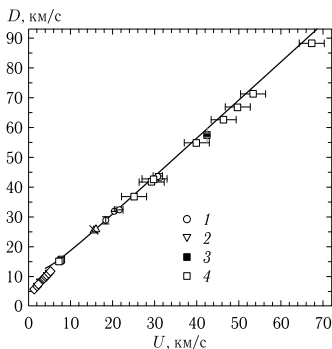


Рис. 4.20. Ударная адиабата железа ( $m = 1$ ) в  $D-U$  переменных ( $D$  и  $U$  — скорость фронта и массовая скорость [184]). Обозначения: 1 — экспериментальные данные [187]; 2 — экспериментальные данные [188]; 3 — эксперимент [180]. Сплошная кривая — псевдопотенциальная модель [171], модифицированная с учетом многократной ионизации и электронного вырождения в уравнении состояния плазмы (ограничение связанных состояний в статсуммах атомов и ионов на среднем расстоянии между тяжелыми частицами)

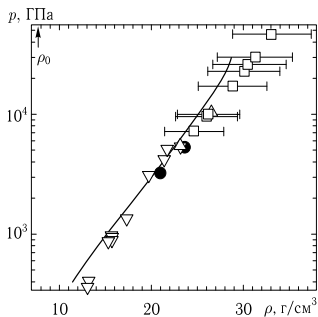


Рис. 4.21. Ударная адиабата железа ( $m = 1$ ) в переменных плотность — давление [184] (обозначения те же, что на рис. 4.20); стрелка — нормальная плотность железа

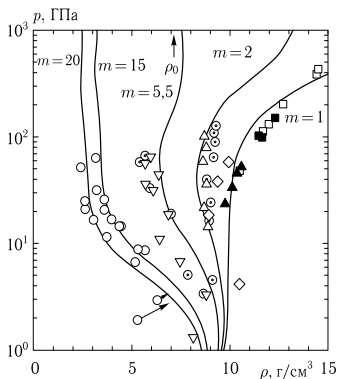


Рис. 4.22. Широкодиапазонные свойства модифицированной химической модели. Ударные адиабаты сплошного и пористого никеля [189, 190]). Обозначения:  $m = \rho_0/\rho_{00}$  — пористость образцов никеля; стрелка — нормальная плотность никеля; значки — экспериментальные данные [191, 192]; сплошная линия — вычисления по коду SANA-IV

железа использовался модифицированный вариант псевдопотенциальной модели, обобщенный на случай многократной ионизации. Учитывая высокий уровень плотностей, достигнутый при сверхсильном ударе сжатии железа, указанный выше учет кулоновской неидеальности сочетался с ограничением

связанных состояний многократно ионизованных ионов железа на среднем расстоянии между тяжелыми частицами. Результаты расчета, представленные на рис. 4.20, 4.21 и 4.22, демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментальными данными различных авторов. Следует подчеркнуть, что в терминах химической модели совокупность описываемых состояний плазмы железа занимает диапазон от сильно- до слабонеидеальной плазмы с переменной степенью ионизации, вырождением электронов и заметным диапазоном температур. Это показано в таблице 4.7, где представлена последовательность значений некоторых термодинамических параметров и безразмерных критериев, реализуемая в рассматриваемом интервале адиабаты Гююнио.

Заметим, что представленные данные по ударно-сжатым меди и алюминию лежат в области, далеко выходящей за пределы традиционного диапазона применения химической модели плазмы.

Более обнадеживающими с этой точки зрения представляются эксперименты по многократному ударному сжатию.

#### 4.8. Термодинамика ударно сжатой плазмы мегабарного диапазона давлений. Неидеальность и вырождение

Подход на основе квазихимического представления — химической модели, — изложенный выше (условно назовем его SANA) неоднократно применялся для описания термодинамических свойств плазмы в самых различных областях параметров — от состояний близких к состоянию конденсированного вещества до разреженной плазмы Солнца [193, 194]. В настоящем параграфе представлены результаты применения подхода SANA ДЛЯ описания водорода (дейтерия) и инертных газов, сжатых мощными ударными волнами. Эксперименты по ударному сжатию газов [195–204] охватывают диапазон по давлениям до 100 ГПа и выше, по плотностям до  $0,8 \text{ г/см}^3$  для дейтерия и  $10 \text{ г/см}^3$  для ксенона. Исследованная в экспериментах область параметров характеризуется чрезвычайно сложными и разнообразными процессами, которые должны быть отражены соответствующими физическими моделями. В первую очередь по мере сжатия вещества может резко меняться компонентный состав среды, что сопровождается появлением сильного межчастичного взаимодействия: кулоновского — между электронами и ионами, поляризационного — зарядов с нейтралами, а также короткодействующего — между нейтральными частицами. Поскольку характерное межчастичное расстояние в рассматриваемой нами среде сравнимо с характерным размером атомов и ионов, занимаемая ими часть фазового объема становится недоступной для других частиц, что приводит к росту их кинетической энергии и соответствующим вкладам в свободную энергию таких сильно сжатых неупорядоченных структур. Кроме того, сильное сжатие вызывает изменение энергетического спектра связанных состояний атомов и молекул. По мере сжатия следует учитывать также изменение статистики электронов непрерывного спектра от больцмановской к статистике Ферми, так как параметр вырождения  $n_e \Lambda_e^3$  в этих условиях может возрасти в несколько раз.

Для расчетов термодинамических параметров плазмы в мегабарном диапазоне давлений были использованы следующие составляющие полного тер-

динамического приближения, наиболее подробно рассмотренного в разделе для описания неидеальной плазмы умеренной плотности.

- Свободная энергия квазинейтральной смеси электронов, ионов, атомов и молекул может быть записана в виде вклада идеально-газовой компоненты и члена, ответственного за межчастичное взаимодействие

$$F \equiv F_i^0 + F_e^0 + F_{ii,ie,ee,\dots}^{\text{взаим}}. \quad (4.198)$$

- Предполагалось, что тяжелые частицы (атомы, ионы и молекулы), подчиняются статистике Больцмана (при плотностях и температурах, достигаемых в ударно-волновом эксперименте это условие далеко от нарушения), а их вклад имеет стандартный вид:

$$F_i^0 = \sum_j N_j k_B T \left( \ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right), \quad (4.199)$$

где  $\sigma_j$  — статсуммы (4.30) атомов, молекул и ионов.

- Электроны рассматривались как частично вырожденный идеальный Ферми-газ, при этом идеальногазовое слагаемое  $F_e^0$  имело вид (4.191) [55].

Заметим, что учет эффектов электронного вырождения весьма важен в обсуждаемой здесь области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения  $n_e \Lambda_e^3$  может достигать нескольких десятков. При этом в силу положительности поправки к химическому потенциалу электронное вырождение приводит к более низким значениям степени ионизации плазмы.

- Из всего спектра взаимодействий учитывались кулоновское взаимодействие заряженных частиц и короткодействующее отталкивание частиц на близких расстояниях.

Для описания кулоновского взаимодействия применялся вариант псевдопотенциальной модели для многократной ионизации [171, 205]. Центральным моментом этой модели является явный учет «некулоновости» взаимодействия свободных зарядов на близких расстояниях, приводящей в условиях сильной неидеальности к заметному положительному сдвигу не только потенциальной, но и средней кинетической энергии свободных зарядов. При этом, следуя [171, 205], глубина электрон-ионного псевдопотенциала  $\Phi_{ie}^*(0)$  связывалась с границей отделяющей свободные состояния каждой электрон-ионной пары и соответствующие ей связанные состояния в статсумме. Электрон-ионный псевдопотенциал Глаубермана имел вид (рис. 4.23)

$$\begin{aligned} \Phi_{ie}^*(r) &= -\frac{Z_i e^2}{r} (1 - e^{-r/\sigma_{ie}}); & \{\sigma_{ie} \equiv \sigma_{ie}(n, T)\}, \\ \Phi_{\alpha\alpha}^*(r) &= -\frac{Z_\alpha Z_\alpha e^2}{r}; & \{\alpha = i, j\}. \end{aligned} \quad (4.200)$$

На рис. 4.23 а этот потенциал сопоставляется с иными псевдопотенциалами, предложенными для плазмы.

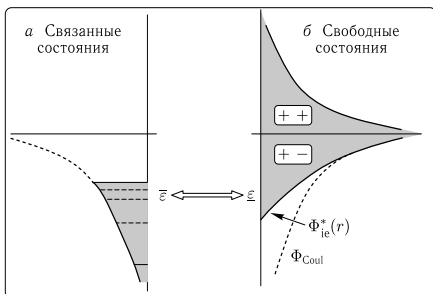


Рис. 4.23. Электро-ионный псевдопотенциал Глаубермана:  $\underline{\varepsilon}$  и  $\bar{\varepsilon}$  — подвижная взаимная граница, ограничивающая энергии свободных и связанных состояний

Параметры корреляционных функций с потенциалом (4.200) определялись из условий, справедливых при произвольных значениях кулоновского параметра неидеальности,  $\Gamma_D = [4\pi(e^2/k_B T) \sum n_\alpha z_\alpha^2]^{-1/2}$ .

1. Условие локальной электронейтральности:

$$\int \left\{ n_{ie}[F_{ie}(r) - 1] + \sum_j n_{ij}Z_j[F_{ij}(r) - 1] \right\} dr = -Z_i. \quad (4.201)$$

2. Условие дипольного экранирования:

$$\int \left\{ n_{ie}[F_{ie}(r) - 1] + \sum_j n_{ij}Z_j[F_{ij}(r) - 1] \right\} \left( \frac{r}{r_D} \right)^2 dr = -3Z_i. \quad (4.202)$$

3. Неотрицательность корреляционных функций:

$$F_{ik}(r) \geq 0. \quad (4.203)$$

4. Связь амплитуды экранирующего облака с глубиной электрон-ионного псевдопотенциала:

$$F_{ei}(0) \equiv 1 + \Psi_{ei}(0) \approx \beta\Phi_{ei}^*(0); \quad F_{ii} \approx 0. \quad (4.204)$$

**Принципиальные моменты псевдопотенциальной модели.** Глубина электрон-ионного псевдопотенциала связана с положением принятой (вообще говоря, произвольной) границы  $-\varepsilon$ , разделяющей свободные и связанные состояния:

$$\Phi_{ie}^*(r) = \frac{Z_i e^2}{r} (1 - e^{-r/\sigma}) \equiv - \left( \frac{Z_i e^2}{\sigma} \right) \frac{(1 - e^{-r/\sigma})}{r/\sigma} \geq -\Phi(0) \sim -\varepsilon; \quad [\sigma \equiv \sigma(n, T)]. \quad (4.205)$$

Одновременно эта же величина —  $\varepsilon$  — является границей, связанных состояний, учитываемых при вычислении статсуммы возбуждения атомов и ионов.

Выбор смысла и величины  $\varepsilon(n, T)$  не ограничен традиционным разделением по относительной энергии связанной пары, а может быть произвольным, и в частности, соответствовать покоординатному принципу разделения и др. Для ион-ионного и электрон-электронного потенциалов сохранялась кулоновская форма:

$$\Psi_{ee}^*(r) = \frac{e^2}{r}, \quad \Psi_{ii}^*(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r}.$$

После выбора псевдопотенциала межчастичного взаимодействия дальнейшие приближения, необходимые для вычисления поправок на неидеальность, рассматриваются на языке парных корреляционных функций. При этом развивается подход, проверенный на кулоновских моделях, когда для указанных парных корреляционных функций сохраняется функциональная зависимость, соответствующая пределу слабой неидеальности:

$$F_{ab}(r) = 1 \pm A \frac{e^{-pr} - e^{qr}}{r} \equiv 1 \pm \Psi_0 e^{-\nu r} \frac{\text{sh } \omega r}{\omega r}. \quad (4.206)$$

Важным преимуществом формы (4.206) является то, что  $\nu$  и  $\omega$  могут быть мнимыми; при этом корреляционная функция (4.206) становится осциллирующей. В то же время параметры этой зависимости, выбираются из общих условий не зависящих от малости взаимодействия (неидеальности). При вычислении эффектов неидеальности в поправках к термодинамическим величинам явным образом учитываются следующий из теоремы вириала сдвиг средней кинетической энергии свободных зарядов,  $\Delta U_{\text{kin}} = 3\Delta pV - \Delta U$ :

$$U = U_{\text{kin}} + U_{\text{pot}}, \quad 3pV = 2U_{\text{kin}} + U_{\text{pot}},$$

$$\Delta U_{\text{pot}} = -Vn \int \Phi_{\text{coul}} (F_+ - F_-) dr, \quad (4.207)$$

$$\Delta U = -Vn^2 \int (F_+ \Phi_{ei}^* - F_- \Phi_{ij}^*) dr, \quad (4.208)$$

$$\Delta pV = 1/3(2\Delta U - \Delta U_{\text{pot}}) = 1/3(2\Delta U_{\text{kin}} + \Delta U_{\text{pot}}), \quad (4.209)$$

$$\Delta \mu_i = \Delta \mu_e \sim (N_i + N_e)^{-1} \Delta U. \quad (4.210)$$

Здесь  $\Delta U$  и  $\Delta U_{\text{pot}}$  — поправки к полной внутренней и отдельно к средней потенциальной энергии плазмы, а  $\mu_i$  и  $\mu_e$  химические потенциалы свободных зарядов. При этом соотношение (4.208) является точным, когда псевдопотенциал (4.205) не зависит от термодинамических параметров, а (4.209) является следствием теоремы вириала.

Широко используемое соотношение между поправками к давлению и внутренней энергии свободных зарядов —  $\Delta U = 3\Delta pV$ , оставаясь справедливым в области слабой неидеальности, более не сохраняется в области заметной неидеальности ( $\Gamma \sim I$ ). Это является, во-первых, результатом явного учета квантовых эффектов, влияющих на вклад свободных и связанных состояний, а во-вторых, следствием самой процедуры перехода к химической модели.

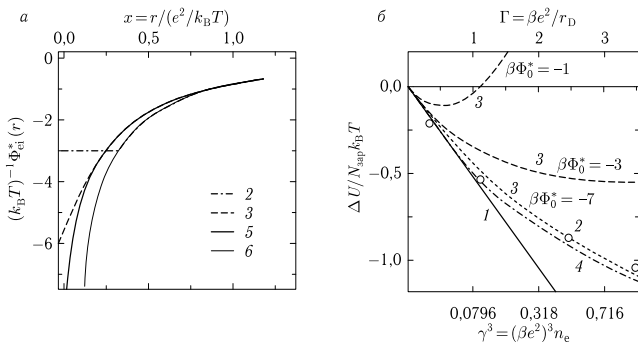


Рис. 4.24. а) Эффективный электрон-ионный псевдопотенциал  $\Phi_{ei}^*(r)$  (деленный на  $k_B T$ ) [171]; 2 — упрощенный («нулевая модель») электрон-ионный псевдопотенциал [206–209]  $\beta \Phi_{ei}^*(0) = -3$ ; 3 — эквивалентный псевдопотенциал  $\Phi_{ei}^*(r)$  из работы [171] ( $\beta \Phi_{ei}^*(0) = -6$ ); 5 — электрон-ионный псевдопотенциал водорода [210] at  $T = 10^3$  K; 6 — кулоновский потенциал. б) Безразмерная конфигурационная энергия  $\Delta U/N_{зар} k_B T$  подсистемы свободных зарядов: 1 — дебаевское приближение (дебаевский предел); 2 — конфигурационная энергия Нормана и др., вычисленная методом Монте-Карло для упрощенного («нулевая модель») электрон-ионного псевдопотенциала с  $\beta \Phi_{ei}^*(0) = -3$ ; 3 — линеаризованная версия эквивалентного псевдопотенциала  $\Phi_{ei}^*(6)$   $\beta \Phi_{ei}^*(0) = -7$ ; 4 — нелинейное приближение [39] для эквивалентного псевдопотенциала  $\Phi_{ei}^*(r)$  с  $\beta \Phi_{ei}^*(0) = -7$

Заметим, что поправки на взаимодействие зарядов, полученные из условий (4.200)–(4.204) близки к дебаевским при  $(\Gamma_D \ll 1)$  отличаясь от них меньшими значениями при  $(\Gamma_D \gg 1)$  [171, 205].

Из рис. 4.24 можно заключить, что для эквивалентных псевдопотенциалов результаты, получаемые на основе приведенных выше простых соотношений, находятся в удовлетворительном соответствии с результатами прямого численного моделирования методом Монте-Карло [206–209]. Это можно рассматривать как подтверждение сделанного в работах [6, 39, 211] вывода, что соблюдение общих соотношений является ключевым условием для построения удовлетворительного описания термодинамики сильнонеидеальных кулоновских систем.

Для случая частично ионизованной плазмы ксенона были проведены расчеты [168] с использованием указанного выше варианта псевдопотенциальной модели [171]. В этих расчетах граница, разделяющая свободные и связанные состояния атома и иона и соответствующее ограничение атомной статсуммы выбирались на глубине энергии связи порядка  $k_B T$ , что практически совпадает с известной и часто рекомендуемой процедурой вычисления статсуммы по так называемой формуле Бриллюэна–Планка–Ларкина (см. подробнее [4]). Сравнение показало (рис. 4.25 и 4.26), что предложенный вариант псевдопотенциальной модели [171] позволяет качественно и, учитывая реальную

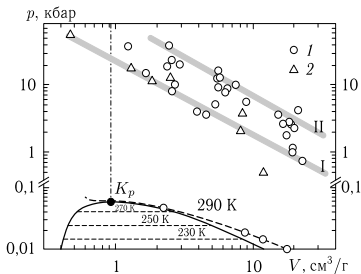


Рис. 4.25. Фазовая диаграмма ксенона [168]. Отмечены границы двухфазной области и критическая точка  $K_p$ . 1 — экспериментальные данные [168]; 2 — экспериментальные данные [167] после коррекции [172] начальной плотности невозмущенного газа перед ударным скачком с учетом уравнения состояния реального газа; пунктирные линии — изотермы в двухфазной области [172], штрих-пунктирная линия — критическая изохора ( $V = V_c$ ), серые линии — границы однократной ионизации — «I» ( $\chi_{Xe^+} = \chi_{Xe}$ ,  $\chi_{Xe} = N_{Xe}/N_{total}$ ) и двукратной ионизации — «II» ( $\chi_{Xe^{++}} = \chi_{Xe^+}$ )

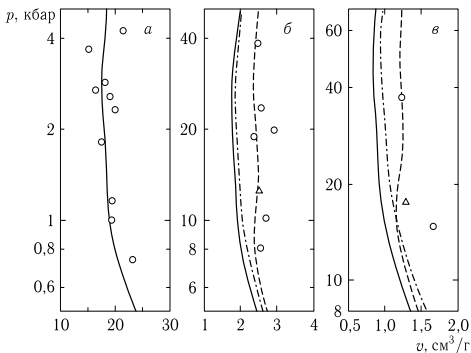


Рис. 4.26. Фазовая диаграмма ксенона [168]. Сравнение экспериментальных ударных адиабат и результатов модельных расчетов. Сплошные линии — взаимодействие между заряженными частицами учитывалось в модифицированном кольцевом дебаевском приближении в большом каноническом ансамбле [104, 173]; штрих-пунктирная линия — добавлено атом-атомное взаимодействие в приближении второго вириального коэффициента [174]; пунктирная линия — вычисление на основе модифицированной псевдопотенциальной модели [171] с учетом равенства глубины псевдопотенциала свободных частиц и верхней границы обрезания внутриатомных состояний, выбранной равной  $k_B T$ . Давление перед фронтом ударной волны: а)  $p_0 = 1$  бар; б)  $p_0 = 10$  бар; в)  $p_0 = 20$  бар

точность и разброс экспериментальных данных, количественно описать параметры экспериментально измеренных ударных адиабат ксенона.

На рисунке 4.25 приведено сравнение экспериментальных данных с результатами настоящих расчетов. Полученный в модели [171] сдвиг ударных адиабат непосредственно связан в данном случае с наличием в модели явной (положительной) поправки к средней кинетической энергии свободных зарядов, что в терминах УРС эквивалентно, в сравнении с большинством традиционных приближений, эффекту дополнительного отталкивания.

Аналогичный результат был получен в сравнительных расчетах с использованием модели [171] параметров ударно сжатой плазмы цезия [21, 212]. В этих экспериментах была достигнута более высокая точность измерений и перекрыт более широкий диапазон давлений и удельных объемов, и что более важно, более широкий диапазон значений параметра плазменной неидеальности  $\Gamma_D$  (в силу предельно малого потенциала ионизации цезия). Еще одним отличительным свойством экспериментов [21, 212] и сопровождавших их серии расчетно-теоретических работ [21, 213] является, по-видимому, одна из первых (если не первая) реализация известной идеи Я. Б. Зельдовича [214] о восстановлении температуры по результатам ударно-волнового эксперимента. Однако точность восстановленной таким образом температуры и специфический эффект взаимной компенсации различных источников неопределенности в модельном УРС цезия в данном диапазоне параметров, привели к тому, что окончательно пересчитанные «экспериментальные» результаты по термическому  $p(V, T)$  УРС цезия оказались совместимыми практически со всеми теоретическими приближениями, предложенными впоследствии для описания этих экспериментальных данных.

Вклад короткодействующего отталкивания молекул, атомов, ионов описывался в рамках приближения мягких сфер [215], обобщенного на случай многокомпонентной смеси сфер различных радиусов:

$$\Delta f_{SS} \equiv \frac{\Delta F_{SS}}{Nk_B T} = C_s y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{6} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3}; \quad (4.211)$$

$$y = \frac{3Y\sqrt{2}}{\pi}; \quad Y = \frac{4\pi r_c^3}{3} = \frac{\pi \sigma_c^3}{6},$$

где  $N = \Sigma N_j$  — полное число частиц, описываемых приближением мягких сфер,  $C_s$  — маделунговская константа [215]:

$$C_s = 6 + \frac{6,669}{s-3} - 1,043(s-4)^{0,389} \exp[0,156(s)],$$

для потенциала

$$V(r) = \varepsilon_{SS} \left( \frac{3r_c}{r} \right)^s. \quad (4.212)$$

При этом средний «радиус» (характерный размер)  $r_c$  мягких сфер определялся выражением

$$r_c = \left[ \frac{\Sigma n_j r_j^q}{\Sigma n_j} \right]^{1/q}. \quad (4.213)$$

Вообще говоря, степень отталкивания  $s$  также можно считать средней величиной, если частицы разных сортов обладают различной «мягкостью» отталкивания, т. е.

$$s = \left[ \frac{\sum n_j s_j^\ell}{\sum n_j} \right]^{1/\ell}, \quad (4.214)$$

где  $q, \ell$  — степени усреднения в (4.213), (4.214) (в простейшем случае  $q = 3, \ell = 1$ , что и было принято в дальнейшем).

Тогда поправка к давлению за счет отталкивания частиц будет иметь вид

$$\frac{\Delta p_{SS}}{nk_B T} = y \Delta f'_{SS}(y) = C_s \frac{s}{3} y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{2} \frac{s}{9} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3}, \quad (4.215)$$

— к внутренней энергии

$$\frac{\Delta p_{SS}}{N k_B T} = \frac{3}{s} \frac{\Delta P_{SS}}{n k_B T} = C_s y^{s/3} (\varepsilon_{SS}/k_B T) + \frac{s+4}{2} \frac{1}{3} Q y^{s/9} (\varepsilon_{SS}/k_B T)^{1/3}, \quad (4.216)$$

— к химическому потенциалу

$$\frac{\Delta \mu_i}{k_B T} = \Delta f_{SS} + \left[ \frac{\partial \Delta f_{SS}}{\partial N_i} \right]_{V,T}; \quad (4.217)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \Delta f}{\partial N_i} \right)_{V,T} &= \frac{\partial C_s}{\partial N_i} y^{s/3} \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} + \left\{ \frac{s}{3} \frac{1}{y} \frac{\partial y}{\partial N_i} + \frac{1}{3} \frac{\partial s}{\partial N_i} \ln y \right\} \times \\ &\times \left\{ C_s y^{s/3} \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} + \frac{s+4}{2} Q y^{s/9} \frac{1}{3} \left[ \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} \right]^{1/3} \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial s}{\partial N_i} Q y^{s/9} \left[ \frac{\varepsilon_{SS}}{k_B T} \right]^{1/3}. \end{aligned} \quad (4.218)$$

В формуле (4.218) производные в правой части определяются следующими выражениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_s}{\partial N_i} &\equiv \left[ \frac{\partial C_s}{\partial N_i} \right]_{V,T} = \frac{\partial s}{\partial N_i} \left\{ \frac{6,669}{(s-3)^3} - 1,043(s-4)^{0,389} \circ \right. \\ &\left. \circ e^{0,156(s)} \left[ \frac{0,389}{s-4} - 0,156 \right] \right\}; \end{aligned} \quad (4.219)$$

$$\frac{\partial s}{\partial N_i} \equiv \left[ \frac{\partial s}{\partial N_i} \right]_{V,T} = \frac{1}{\ell N} \left[ \frac{s_j^\ell}{s^\ell} - 1 \right]; \quad (4.220)$$

$$\frac{\partial y}{\partial N_i} \equiv \left[ \frac{\partial y}{\partial N_i} \right]_{V,T} = \frac{y}{N} \left\{ 1 + \frac{3}{q} \left( \frac{r_j^q}{r_c^q} - 1 \right) \right\}. \quad (4.221)$$

Из выражений (4.217)–(4.221) следует, что поправка к химическому потенциалу частицы тем больше, чем больше ее радиус и степень отталкивания. Отсюда ясно, что для уменьшающейся последовательности радиусов ионов с возрастанием их заряда мы получим и уменьшающийся ряд поправок к химическому потенциалу (4.217), что приведет к соответствующему снижению энергии ионизации (диссоциации) для каждого типа частиц. Наиболее просто

это видно для частного случая частиц с одинаковыми степенями отталкивания  $s_j = s \equiv \text{const}$  и различными радиусами:

$$\frac{\Delta\mu_{jSS}}{k_B T} = \frac{\Delta F_{SS}}{N k_B T} + \frac{\Delta p_{SS}}{n k_B T} \left[ \frac{r_j}{r_c} \right]^3. \quad (4.222)$$

Отсюда видно, что для частиц с различными радиусами поправки (4.222) различны, что в свою очередь может предопределять уменьшение энергий ионизации (диссоциации) с возрастанием плотности вещества. Описанная выше термодинамическая модель имеет правильную асимптотику при низких плотностях среды, совпадая с хорошо известными теориями разреженной плазмы и газов. Рассмотрим далее особенности расчета термодинамических свойств с использованием приближения (4.198)–(4.222) для инертных газов и водорода (дейтерия).

### 4.9. Термодинамика газов

При выборе параметров модели (4.198)–(4.222) для ударно-сжатых исходно сжиженных инертных газов выбор радиусов атомов (при фиксированной энергетической константе  $\varepsilon_{SS}$ ) и степени отталкивания в приближении смеси мягких сфер (4.211)–(4.222) осуществлялся из условия наилучшего в рамках этой модели описания расчетных данных холодной кривой ( $T = 0$  К) для плотностей экспериментального диапазона. Полученные в результате такой процедуры значения представлены в следующей таблице.

	$s$	$\varepsilon_{SS}$	$R_{\text{atom}}$	$Q$
He	12	0,01354	$2,82a_0$	1
Ar	12	0,0125 эВ	$3,2a_0$	1
Kr	12	0,0171 эВ	$3,54a_0$	1
Xe	10,5	0,0221 эВ	$3,83a_0$	1

Соотношения радиусов атомов и ионов различной кратности определялись из расчета их электронной структуры в приближении ограниченного атома методом Хартри–Фока (см. п. 4.6). На рис. 4.27 представлена зависимость энергии атома и ионов ксенона от радиуса атомной ячейки.

Отношение радиусов атома и ионов выбиралось на линии, где сдвиг энергии при сжатии сравнивался с потенциалом ионизации атома, т. е. на линии  $\Delta E/I = 1$ .

С использованием изложенной выше модели (4.198)–(4.222) были проведены расчеты ударных адиабат и изотерм ксенона, криптона и аргона. Во всех трех случаях начальное состояние ударно-сжатых газов соответствовало жидкости. На рисунке 4.28 представлена ударная адиабата ксенона в координатах плотность–давление.

Наряду с ударными экспериментами представлены также данные по многократному ударному сжатию [220]. Видно, что в целом при помощи принятого приближения удается достичь удовлетворительного описания эксперимен-

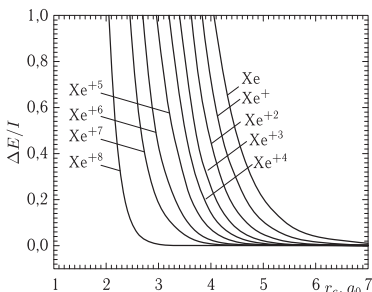


Рис. 4.27. Изменение энергии атома и ионов Xe при сжатии в сферической ячейке по отношению к потенциалу ионизации изолированного атома

тальных данных. Имеющееся же отличие при низких давлениях и температурах можно объяснить недостаточной точностью аппроксимации состояний ксенона в жидкой фазе.

Использование настоящей модели позволяет также удовлетворительно описать ударные адиабаты жидких аргона и криптона (см. рис. 4.29, 4.30). Здесь экспериментальные данные взяты из работ [221, 222].

Отметим, что удовлетворительного согласия удается достичь и с измеренными значениями яркостной температуры и скорости звука в этих веществах.

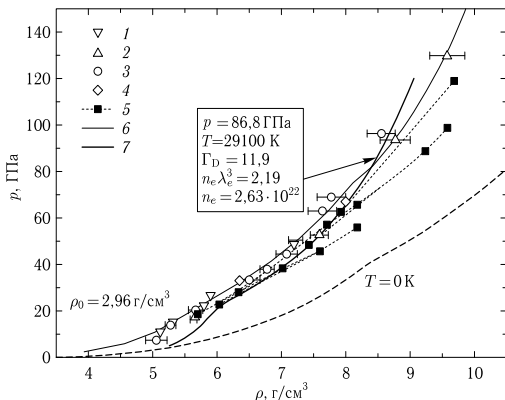


Рис. 4.28. Ударная адиабата ксенона. Экспериментальные данные: 1 — [216], 2 — [217], 3 — [218], 4 — [219], 5 — [220]. Расчетные кривые: 6 — [218], 7 — [5], штриховая линия — «холодная кривая» [218]

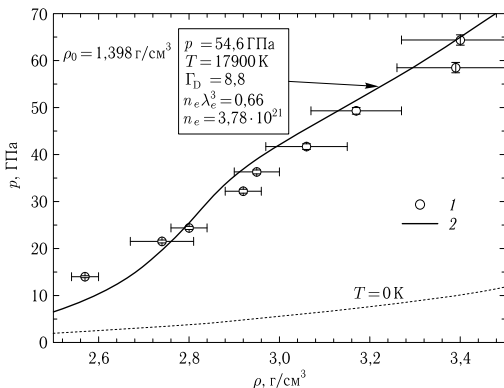


Рис. 4.29. Ударная адиабата аргона. Экспериментальные данные: 1 — [221]. Расчетная кривая: 2 — настоящая работа; штриховая линия — холодная кривая

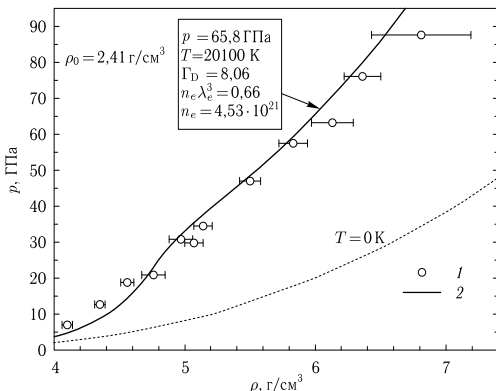


Рис. 4.30. Ударная адиабата криптона. Экспериментальные данные: 1 — [222]. Расчетная кривая: 2 — [205]; штриховая линия — холодная кривая

Сравнение результатов расчета с данными эксперимента по ударно-сжатым инертным газам, проведенное выше, показывает, что модель (4.198)–(4.222) качественно, а в большинстве случаев и количественно описывает поведение неидеальной плазмы в мегабарном и субмегабарном

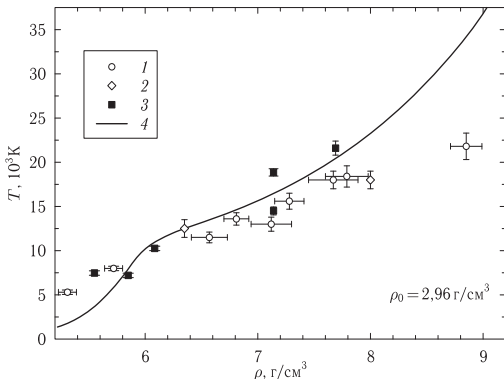


Рис. 4.31. Температура вдоль ударной адиабаты ксенона. Экспериментальные данные: 1 — [218], 2 — [219], 3 — [220], 4 — расчет по модели (4.198)–(4.222)

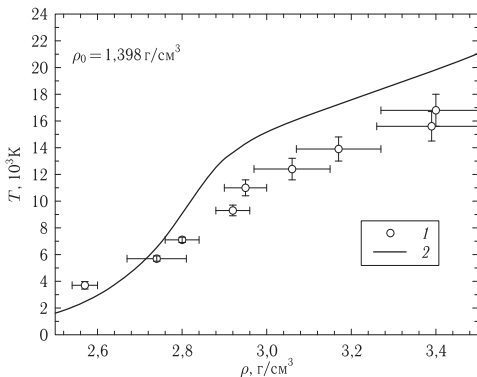


Рис. 4.32. Температура вдоль ударной адиабаты аргона. Экспериментальные данные: 1 — [221], 2 — расчет по модели (4.198)–(4.222)

диапазоне давлений ударного сжатия инертных газов. Подчеркнем основные физические эффекты, присутствующие в модели.

1. Вырождение свободных электронов учитывалось согласно выражению (4.191) [55]. Степень вырождения достигала значений от нескольких единиц до десятков при максимальных сжатиях. Очевидно, что положительность поправки к химическому потенциалу в уравнениях хи-

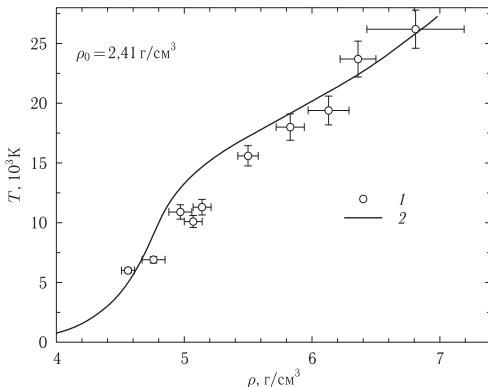


Рис. 4.33. Температура вдоль ударной адиабаты криптона. Экспериментальные данные: 1 — [222], 2 — расчет по модели (4.198)–(4.222)

мического и ионизационного равновесия приводила к снижению степени ионизации плазмы.

2. В силу высоких значений параметра кулоновской неидеальности, что видно из рисунков 4.28–4.30, существенным был учет кулоновского взаимодействия заряженных частиц (4.200)–(4.204), рассчитанного в рамках псевдопотенциальной модели [171, 205], в которой предпринята попытка избежать так называемого «двойного учета» при выделении вклады связанных состояний, когда вклад одних и тех же состояний пары электрон–ион в фазовом пространстве учитывается как вклад среди свободных частиц, так и вклад среди связанных состояний [171, 205]. Поправки к идеальногозодовой части свободной энергии в этом случае ниже по абсолютной величине, по сравнению с классическим дебаевским приближением, что в области высоких параметров неидеальности не приводит к «дебаевской катастрофе», когда значения давления становятся отрицательными.
3. Короткодействующее отталкивание (4.211)–(4.222) соответствовало обобщенной модели мягких сфер. Учет этого эффекта весьма важен в этой области фазовой диаграммы из-за высоких плотностей среды, когда межчастичное расстояние сравнимо с размером частиц ( $\Gamma_\alpha = n_\alpha r_\alpha^3 \approx 1$ ). Заметим, что с уменьшением размера частиц (например, размер ионов с ростом заряда уменьшается), уменьшается значение поправки к химическому потенциалу (4.222), что в свою очередь приводит к тому, что распад частиц большего радиуса на частицы меньшего радиуса с выигрышем объема, занимаемого частицами, становится термодинамически более выгодным. В компонентном составе это выражается в резком возрастании степени ионизации (ионизация давлением). Ниже

это будет показано на примере поведения электропроводности при высоких плотностях вещества.

Заметим, что при сохранении общей тенденции в поведении термодинамических величин, тем не менее, имеются области (см. например рис. 4.32, 4.33), где имеется явное отклонение рассчитанных данных от эксперимента. В частности, это может наблюдаться из-за упрощенного определения параметров отталкивания в модели мягких сфер, что, возможно, потребует в будущем усовершенствования этой процедуры.

#### 4.10. Термодинамика водорода

Особенностью водорода является существование обширной «мономолекулярной» области ( $\rho \leq 0,3 \text{ г/см}^3$ ;  $-\mu_{\text{H}} \geq D(\text{H}_2) \approx 4,5 \text{ эВ}$ ), где термодинамика водорода почти полностью определяется взаимодействием  $\text{H}_2\text{-H}_2$ . В рамках используемой обобщенной модели мягких сфер (4.211)–(4.222) параметры взаимодействия  $\text{H}_2\text{-H}_2$  в данной работе выбирались максимально близкими к параметрам строгого «неэмпирического» атом-атомного приближения [59, 60]. При этом пренебрегалось нецентральностью взаимодействия  $\text{H}_2\text{-H}_2$ . Расчеты показали, что при использовании «мягкого» отталкивания  $V(r) \sim 1/r^6$  могут быть вполне удовлетворительно описаны, как молекулярная часть изотермы  $T = 0$  («холодная кривая»), так и результаты точных расчетов термодинамики смеси ( $\text{H}_2 + \text{H}$ ) методом Монте-Карло [59, 60] для атомно-молекулярной системы.

Как и прежде главной проблемой при описании неидеальности, включая случай плотного водорода, является проблема корректного определения всей совокупности эффективных потенциалов взаимодействия между всеми участниками смеси. Это относится как к взаимодействиям с участием заряженных, так и с участием нейтральных частиц, и прежде всего пар  $\text{H}_2\text{-H}$  и  $\text{H-H}$ . Существенно, что фигурирующее в химической модели эффективное взаимодействие свободных атомов радикально отличается от даваемых строгой теорией синглетной (притягивательной) и триплетной (отталкивательной) ветвей полного потенциала взаимодействия  $\text{H-H}$ , поскольку вклад пар  $\text{H-H}$ , взаимодействующих по синглетной ветви, уже учтен в разряде внутримолекулярного движения. Сказанное тем более справедливо в отношении эффективного взаимодействия с участием (свободных) заряженных частиц, так как в химической модели вклады свободных и связанных состояний должны быть взаимосогласованы (см. приближение (4.194)–(4.204)). На сегодня существует серьезное противоречие в даваемых различными подходами вида и параметров этих эффективных потенциалов. При этом главным объектом противоречивых данных вне мономолекулярной области являются параметры короткодействующего отталкивания  $\text{H-H}$  и  $\text{H-H}_2$ . Один из вариантов — результаты неэмпирического атом-атомного приближения [59, 60], приводящие к относительно большому «собственным объемам» атома водорода. В терминах используемой модификации модели мягких сфер (4.211)–(4.222) результаты почти точно соответствуют приближению «аддитивных объемов»:  $v(\text{H}_2) \approx 2v(\text{H})$ . Такой выбор приводит при  $\rho < \rho^* \approx 0,3 \text{ г/см}^3$  к результатам, прекрасно совпадающим при  $T \leq 10 \text{ КК}$  с точными расчетами методом Монте-Карло [59, 60], а при

$T \geq 10$  кК — и с неаномальной частью результатов расчетов методом квантового Монте-Карло (PIMC [223]). При этих же температурах результаты также удовлетворительно согласуются и с остальными вариантами первопринципных подходов: квантовой молекулярной динамики (ТВМД [224]) и метода «волновых пакетов» (WPMД [225]).

На рис. 4.34 приведены все имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные по однократному ударному сжатию жидкого дейтерия.

В проведенных в прямой ударной волне экспериментах с легкогазовыми пушками [199] реализованы давления до 25 ГПа (кружочки 1 на рис. 4.34). В исследованиях по генерации ударных волн с помощью мощных лазеров [195, 198] (2, 3) достигнуты давления до 300 ГПа и обнаружена аномально высокая сжимаемость дейтерия при давлениях  $p > 40$  ГПа. Проведенные в последнее время эксперименты на Z-пинче [201–203] (4) и на сферических взрывных системах [197, 204] (5) не подтверждают наличие этой аномалии вплоть до  $p \approx 70$  ГПа.

Расчетные ударные адиабаты, полученные при использовании уравнения состояния SESAME [226] (кривая 6), не предсказывают такой аномалии поведения ударной сжимаемости, также как и использование полуэмпирических уравнений состояния [196]. Не ожидается она и при использовании «первопринципных» подходов: метода квантового Монте-Карло [223] (кривая 7) и молекулярной динамики [224]. В работе [228] (кривая 10) представлено интерполяционное уравнение состояния дейтерия, качественно описывающее экспериментальные результаты, полученные на лазерах.

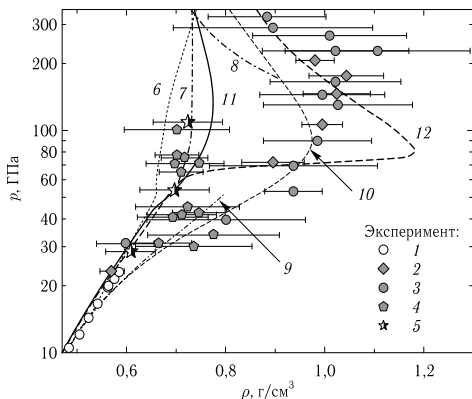


Рис. 4.34. Ударная адиабата дейтерия. Эксперимент: 1 — [199], 2 — [195], 3 — [198], 4 — [201–203], 5 — [197, 204]. Расчет: 6 — [226], 7 — [223], 8 — результаты, полученные в работе [5], 9 — PACH [227], 10 — [228], 11 и 12 — расчет, согласно выражениям (4.198)–(4.222) [229]

Рассмотренный в настоящей работе подход также не воспроизводит этот «провал» в сторону неожиданно высоких степеней сжатия ( $\sigma_{\max} \equiv \rho_{\max} \approx 6,5$  против ожидаемого  $\sigma_{\max} \approx 4$ ) в положении ударной адиабаты дейтерия в области  $p \approx 0,5 \div 2$  Мбар (кривая 11), а также и не содержит аномалий типа фазовых переходов при  $\rho \geq 1$  г/см<sup>3</sup>. Совершенно иначе выглядит термодинамика сжатого водорода (дейтерия) если для описания взаимодействий Н–Н (D–D) воспользоваться широко принятым в приближенных расчетах потенциалом из [230], а для взаимодействия Н–Н<sub>2</sub> воспользоваться стандартными правилами комбинирования. В терминах модификации модели мягких сфер, принятой в данной работе, это соответствует заметно меньшему отношению «собственных» объемов Н и Н<sub>2</sub>  $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,4 \rightarrow 2v(\text{H})/v(\text{H}_2) \approx 0,13$ . Такой выбор «собственного» размера атома немедленно приводит при  $\rho \geq 0,3$  моль/см<sup>3</sup> к «диссоциации давлением», сопровождаемой провалом в ударной адиабате дейтерия (кривая 12).

Различие в поведении дейтерия с разными соотношениями радиусов атома и молекулы дейтерия в первую очередь проявляется на компонентном составе. На рис. 4.35 и 4.36, представлен компонентный состав на ударной адиабате жидкого дейтерия. Видно, что различие в сжимаемости дейтерия в двух вариантах расчета ( $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,4$  и  $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,8$ ) связано с более быстрой диссоциацией в первом случае.

В самое последнее время во ВНИИЭФ были получены новые экспериментальные данные по ударно-сжатому дейтерию. В отличие от процитированных выше и приведенных на рис. 4.34 экспериментов, опыты [232] проводились с газообразным дейтерием предварительно сжатом до давлений 1500 и 2000 бар, что соответствовало плотностям 0,1335 и 0,153 г/см<sup>3</sup>. В этой работе одновременно с параметрами ударной адиабаты измерялась и температура. Модель, примененная нами ранее при описании экспериментов, приведенных на рис. 4.34, была использована и для описания экспериментов [232]. На рис. 4.37 приведены результаты расчета по модели (4.198)–(4.222) для четырех ударных адиабат с начальными плотностями 0,1335, 0,153, 0,171 (жидкий дейтерий) и 0,199 (твердый дейтерий) г/см<sup>3</sup>.

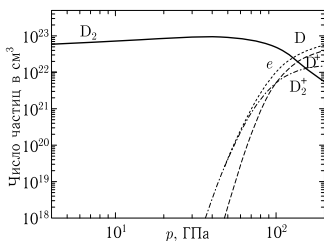


Рис. 4.35. Компонентный состав на ударной адиабате жидкого дейтерия при соотношении  $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,4$

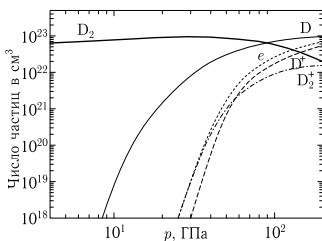


Рис. 4.36. Компонентный состав на ударной адиабате жидкого дейтерия при соотношении  $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,8$

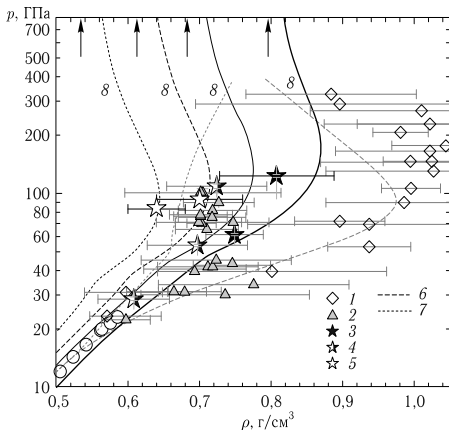


Рис. 4.37. Ударные адиабаты газообразного, жидкого и твердого дейтерия. Эксперимент: 1 — [195, 198]; 2 — [201–203]; 3, 4 — [231], твердый и жидкий дейтерий соответственно; 5 — газообразный дейтерий [232]. Расчеты 6 — [228]; 7 — [226]; 8 — расчет по модели (4.198)–(4.213)

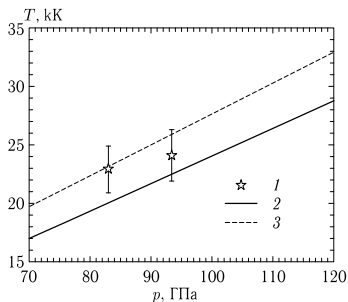


Рис. 4.38. Температура ударно-сжатого газообразного дейтерия. Эксперимент 1 — [232], левая точка — плотность  $0,1335 \text{ г/см}^3$ , правая — плотность  $0,153 \text{ г/см}^3$ ; 2, 3 — расчет по модели (4.198)–(4.222) для этих же плотностей, соответственно

Заметим, что последние расчеты по модели (4.198)–(4.222), представленные на рис. 4.37, 4.38 проведены с соотношением  $d(\text{H})/d(\text{H}_2) \approx 0,8$ , что соответствует результатам работы [59, 60]. Таким образом, рис. 4.37, 4.38 (на рис. 4.38 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных в координатах давление-температура) показывают, что модель представленная в настоящей главе позволяет описать непротиворечивым образом всю совокупность экспериментов, выполненных во ВНИИЭФ, для различных начальных плотностей дейтерия.

### 4.11. Термодинамика плазмы металлов

К настоящему времени основной объем экспериментальной информации по свойствам сильно сжатой плазмы получен динамическими методами [233], использующими технику мощных ударных волн для сжатия и необратимого разогрева вещества. Применение взрывных и пневматических метательных устройств в такого рода опытах позволило провести изучение и анализ теоретических моделей термодинамических, электрофизических и оптических свойств ударно-сжатых цезия, инертных газов и водорода в условиях сильной неидеальности. Кратность ионизации ( $\alpha = n_e / (n_\alpha + n_i)$ ) такой среды не превышала 1–2. Выход за рамки этих условий — переход к параметрам, при которых вещество становится многократно ионизованным с частично вырожденными электронами — может быть осуществлен путем привлечения экспериментальных данных по сжатию сплошных и пористых металлов ударными волнами с амплитудным давлением в сотни тысяч, миллионы атмосфер. К настоящему времени получен значительный объем экспериментальных данных по динамическому сжатию металлов (см. [234–236] и содержащиеся там ссылки) с использованием ударных волн, генерируемых взрывом химических [234, 237, 238], и ядерных [239] ВВ, пневматическими метательными устройствами [240], а в последнее время — концентрированными лазерными [241], рентгеновскими [242] и ионными [243] потоками. Данные по ударно-волновому сжатию, дополненные результатами регистрации адиабат разгрузки ударно-сжатых металлов, составляют основу для конструирования полумпирических уравнений состояния [244] путем оптимального выбора констант в функциональных термодинамических соотношениях, основанных на упрощенных термодинамических моделях. Вместе с тем, в процессе ударного сжатия уже при относительно невысоких (100–200 ГПа) давлениях происходит плавление, а затем — прогрессирующая термическая ионизация и ионизация вещества давлением. Таким образом, реализуется плотная неупорядоченная многократно ионизованная система заряженных частиц — электронно-ионная среда со сложным спектром интенсивных коллективных взаимодействий. По этой причине ударно-сжатые металлы представляют интереснейшим объектом для проверки теоретических моделей сильно сжатой плазмы как с точки зрения поиска плазменных фазовых переходов [169], так и для анализа различных моделей описания неидеальности сильно сжатой плазмы при высоких концентрациях энергии. По существу, речь идет о распространении плазменных моделей [245] на нетрадиционную для них область конденсированных плотностей и мегабарных давлений, где до последнего времени применялись либо полумпирические аппроксимационные уравнения состояния [245], либо далекие экстраполяции квазиклассических приближений [246]. Наличие такого рода термодинамических измерений в области перехода «металл-диэлектрик» позволило бы кроме того проверить гипотезу [109] о связи металлизации с фазовым превращением первого рода в неупорядоченных средах.

Интересующий нас диапазон параметров сильно неидеальной системы соответствует пониженным по сравнению с твердотельными значениям плотности  $\rho_0$  и энергиям, превосходящим энергию связи атомов и молекул в твердом

теле (примерно  $1 \text{ эВ}$  на частицу). Для генерации таких состояний металлов использовалось ударно-волновое сжатие мелкодисперсных (пористых) металлов [247], что дает возможность увеличить эффекты необратимой диссипации энергии на фронте ударного разрыва и получить более высокие разогревы вещества. Для ряда металлов значение пористости  $m = \rho_0/\rho_{00}$  ( $\rho_{00}$  — плотность пористого образца) лежало в диапазоне  $1 \leq m < 30$ , так что экспериментальные данные охватывали значительную область как по плотностям вещества за фронтом ударной волны, так и по температурам. Для никеля максимально возможные пористости ( $m = 15, 20$  и  $28$ ) и давления ударного сжатия более  $80 \text{ ГПа}$  [191, 192]; для меди это величины  $m = 10$  [190], для железа  $m = 20$  [248], для алюминия  $m = 8$  [268].

Данный параграф посвящен построению моделей неидеальной плазмы для описания ударно-сжатых пористых металлов, анализу эффектов влияния взаимодействия частиц на термодинамические функции неидеальной плазмы в условиях ударно-волнового нагружения и сопоставлению полученных в результате расчета данных с результатами эксперимента.

Для того, чтобы отметить общие особенности перечисленных выше экспериментальных данных по ударному сжатию пористых металлов рассмотрим, следуя [248], диаграмму внутренняя энергия ( $E$ )–плотность ( $\rho$ ), дополненную расчетом изотерм вещества с использованием плазменной модели ограниченного атома. На рис. 4.39, и 4.40 приведена  $E$ – $\rho$ -диаграмма и диаграмма равновесного состава для никеля [249].

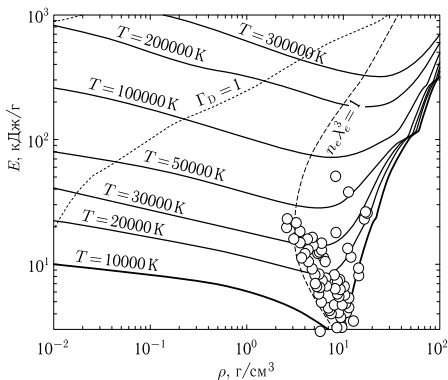


Рис. 4.39. Диаграмма плотность–энергия для плазмы никеля. Изображены расчетные изотермы и экспериментальные точки, полученные в результате ударного сжатия сплошных и пористых образцов никеля [190, 250]. Отмечены линии постоянных параметра кулоновской неидеальности ( $\Gamma_D = [4\pi(e^2/k_B T)^3 n_e z_\alpha^2]^{1/2}$ ) и параметра вырождения электронов —  $n_e \lambda_e^3$

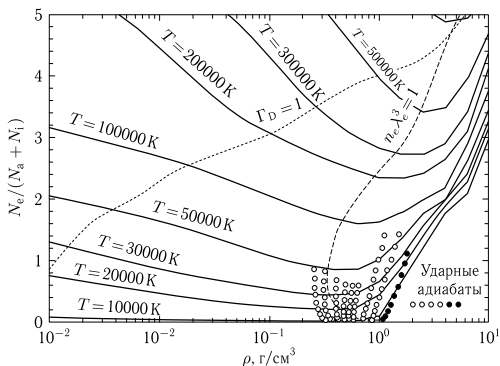


Рис. 4.40. Поведение степени ионизации плазмы никеля при сжатии [189]. Изображены степень ионизации вдоль изотерм (сплошные кривые) и расчетных ударных адиабат (точки) сплошного и пористых образцов никеля, соответствующих эксперименту [192, 250]. Отмечены линии постоянных параметра кулоновской неидеальности ( $\Gamma_D = [4\pi(e^2/k_B T) \sum n_a z_a^2]^{1/2}$ ) и параметра вырождения электронов ( $n_e \lambda_e^3 = 1$ ) в плазме

Рисунок 4.39 демонстрирует тот факт, что вся фазовая диаграмма вещества (диаграммы других металлов подобны обсуждаемой) распадается на две области качественно различного поведения термодинамических зависимостей. Большую часть занимает область относительно разреженной ( $\rho \ll \rho_0$ ) «газовой» плазмы, характеризуемой двумя отличительными признаками — плавным убыванием энергии при изотермическом сжатии и отчетливым проявлением (на больших интервалах изменения плотности) так называемых оболочечных осцилляций всех термодинамических зависимостей (см. подробнее [251]). При  $\rho > \rho_0$  такое поведение сменяется резким ростом энергии и обобщенного фактора сжимаемости —  $Z(n_{\text{nucl}}, n_e, T) = p/p^{\text{id}}$ , что традиционно интерпретируется как «ионизация давлением». Этот процесс в пределе очень высокой плотности завершается выходом в область состояний, хорошо описываемых моделью системы подвижных ядер, погруженных в слабонеидеальный газ вырожденных электронов. Для описания термодинамики в этой области успешно применим хорошо развитый аппарат ячеечных представлений [20, 24, 252]. Между двумя, указанными выше, областями параметров располагается переходная область, характеризующаяся минимальными значениями внутренней энергии и фактора сжимаемости и максимальным нарушением условий слабой неидеальности. Глубина и местоположение на изотермах минимумов, соответствующих термическому и calorическому уравнению состояния, может условно рассматриваться как средоточие максимальной неопределенности нашего знания о термодинамических свойствах сжатого и нагретого вещества. Заметим, что область расположения минимумов соответствует так называемой «долине неидеальности». Уникальность ударно-волно-

вого сжатия пористых мишеней состоит в том, что оно дает информацию о поведении плотной сильно неидеальной среды именно в этой, наиболее сложной и интересной области.

В основе описания состояний ударно-сжатых пористых металлов лежал квазихимический подход (химическая модель) [6, 205, 253], общие черты которого рассматривались в предыдущих главах. Итак, свободная энергия для квазинейтральной смеси электронов, ионов, атомов и молекул, представляется как сумма идеально-газовых слагаемых  $F_{i,e}^0$  и совокупности всех компонент и членов ответственных за различные виды межчастичных взаимодействий, рассматриваемых в химической модели раздельно:

$$F \equiv F_i^0 + F_e^0 + F_{ii,ie,ee,\dots}^* \quad (4.223)$$

Атомы и ионы подчиняются Больцмановской статистике и их вклад имеет вид:

$$F_i^0 = \sum_j N_j k_B T \left( \ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{\sigma_j} + \frac{A_j}{k_B T} - 1 \right) \quad (4.224)$$

(здесь  $k_B$  — константа Больцмана,  $\sigma_j$  — индивидуальная статсумма частицы  $j$ -го сорта (в данном случае атома или иона), вычисленная по уровням энергии, отсчитанным от основного состояния частицы,  $\Lambda_j$  — тепловая длина волны де-Бройля  $j$ -го сорта частиц,  $A_j$  — энергия атомизации (разность между энергией основного состояния частицы и энергией основных состояний составляющих ее атомов).

Эффекты электронного вырождения важны в рассматриваемой области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения для свободных электронов может достигать нескольких единиц:

$$n_e \Lambda_e^3 \approx 1.$$

Как было показано в предыдущих параграфах в рамках квазихимического представления, где электроны разделены на два сорта — свободные и связанные — эффект вырождения прежде всего сказывается уже в рамках идеально-газового слагаемого, качественно меняя зависимость давления и химического потенциала от плотности. Основной эффект электронного вырождения в перестройке механизма неидеальности состоит в постепенном ослаблении участия электронов, по мере роста их вырождения, в механизме взаимного экранирования зарядов. Пределом этой тенденции при экстремальном сжатии вещества является «выключение» электронов из этого механизма и переход экранирования в системе ионов в разряд, описываемый так называемой моделью ионной смеси [254] — вариантом модели однокомпонентной плазмы. В нашем случае основным способом учета электронного вырождения был учет этого эффекта в рамках идеально-газового слагаемого свободной энергии, которое имело вид (4.191). В данном случае вырождение электронов приводило прежде всего к эффективному сдвигу ионизационного равновесия в сторону меньших степеней ионизации, а кроме того и к прямой поправке в уравнении состояния, соответствующей дополнительному эффективному отталкиванию.

Описание эффектов неидеальности в данном разделе разбивалось на два этапа. В рамках одного из них, реализованного в виде кода SAHA-3 (см. выше), и неоднократно применявшегося в приложениях [18, 168, 176, 190], используется «минимальный» набор шагов, позволявший в ряде случаев добиться в пределах экспериментальной точности удовлетворительного согласия с данными эксперимента по динамическому (ударно-волновому) сжатию различных веществ: инертных газов, цезия, высоко-пористых образцов металлов и т. д. Некоторая упрощенность этого подхода необходима для возможности эффективного включения процедуры расчета уравнения состояния в достаточно громоздкие газодинамические расчеты, предъявляющие высокие требования к выполнению всех вспомогательных вычислений.

В рамках этого сокращенного подхода использовались следующие приближения.

- Учет электронного вырождения ограничивается идеально-газовым слагаемым.
- Эффект кулоновской неидеальности учитывается в рамках так называемого дебаевского (кольцевого) приближения в большом каноническом ансамбле [170, 255].
- При расчете внутренних статистических сумм возбуждения атомов и ионов учитывается только основное состояние.
- Учитывается интенсивное короткодействующее отталкивание атомов и ионов в рамках приближения смеси твердых шаров с существенно различающимися размерами атомов и ионов различной кратности.
- Атомы и ионы считаются «проницаемыми» для электронов, т. е. последние не включаются в сферу действия приближения твердых сфер и «не чувствуют» эффективного увеличения плотности из-за наличия у атомов и ионов собственного объема.
- Учитывается дополнительное короткодействующее притяжение атомов и ионов, обеспечивающее эффективное описание наличия энергии связи конденсированного вещества.

Одним из преимуществ обсуждаемого сокращенного описания, с точки зрения количественных расчетов, является принципиальное отсутствие в используемой форме учета кулоновской неидеальности и стат-сумм возбуждения, возможности спонтанной потери системой термодинамической устойчивости (матрица  $\|d\mu_i/dn_j\|$  положительно определена при любой степени сжатия плазмы [18]). Специально проведенные расчеты с использованием для раздельного описания ионной неидеальности в так называемой модели ионной смеси [254], а электронной — в модели взаимодействующего электронного газа [256] («Сдвоенная модель ОКП» по терминологии [171]) — данное приближение было использовано в работе [257] для описания термодинамики неидеальной плазмы смеси водорода и гелия) показали, что диапазон параметров, достигаемых при ударном сжатии пористых образцов большинства металлов, попадает в область существования даваемой этим приближением аномалии типа фазового перехода («Ван-дер-Ваальсовых петель»), форма и положение которых существенно зависят от максимальной степени ионизации, допускаемой принятой расчетной процедурой (неустойчивость по степени ионизации).

Подобная чувствительность УРС к выбору приближения, используемого для описания кулоновской неидеальности, характерна именно в этом диапазоне параметров для подавляющего большинства предлагавшихся в литературе моделей кулоновской неидеальности.

Отметим еще раз, что в данной модели кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле [170, 255], обобщенного (см. формулы (4.194)–(4.195)) на случай многократной ионизации: в этом случае параметр неидеальности  $\tilde{\Gamma}_D$  в (4.195) отличается от обычного дебаевского параметра неидеальности  $\Gamma_D$  ( $\Gamma_D^2 \equiv 4\pi[e^2/k_B T]^3 \Sigma n_\alpha z_\alpha^2$ ), а само приближение эквивалентно классическому приближению Дебая–Хюккеля в пределе ( $\Gamma_D \Rightarrow 0$ ) и отличается от него заметно меньшими значениями соответствующих поправок в области умеренной и сильной неидеальности ( $\Gamma \geq 1$ ).

Эффект перекрытия электронных оболочек атомов и ионов при высоких степенях сжатия ведет к появлению интенсивного отталкивания тяжелых частиц на коротких расстояниях. Этот эффект описывался в главе 2, приближением твердых сфер одинакового размера (формула Карнахана–Старлинга [163]), так как его применение ограничивалось областью частичной первой ионизации. В данном случае, вследствие возможности многократной ионизации, этот эффект учитывался в рамках модели смеси твердых сфер различных радиусов. В непосредственных вычислениях использовалась так называемая формула Мансури [258]:

$$\frac{\Delta F_{\text{HSM}}}{\sum_i N_i k_B T} \equiv f_{\text{HSM}}(\nu) = X \frac{\nu}{(1-\nu)^2} + 3Y \frac{\nu}{1-\nu} + (X-1) \ln(1-\nu), \quad (4.225)$$

$$\nu = \frac{4\pi}{3} n \bar{r}^3, \quad \bar{r}^k \equiv \sum_i n_i r_i^k / \sum_i n_i, \quad k = 1, 2, 3, \quad (4.226)$$

$$X = \left(\bar{r}^2\right)^3 \left(\bar{r}^3\right)^{-2}, \quad Y = \overline{r^2 r^1} \left(\bar{r}^3\right)^{-1}.$$

Вклады в давление, энергию и химический потенциал следуют из (4.227), (4.228):

$$\frac{\Delta F_{\text{HSM}}}{\sum_i n_i k_B T} = \frac{\partial f_{\text{HSM}}(\nu)}{\partial \nu}, \quad \frac{\Delta \mu_i}{k_B T} = f_{\text{HSM}}(\nu) + \sum_j n_j \frac{\partial f_{\text{HSM}}(\nu)}{\partial n_i}, \quad (4.227)$$

$$\Delta E_{\text{HSM}} \equiv 0.$$

Для определения радиусов частиц,  $r_j$ , применялись две процедуры. В первой, для расчета электронной структуры атомов и ионов использовалось приближение ограниченного атома (см. п. 4.6) [18, 168], в рамках которого атом (или ион) помещается в сферическую ячейку с жесткими стенками, и с помощью метода Хартри–Фока рассчитывается электронная структура частицы при переменном радиусе атомной ячейки (см. п. 4.6). Результаты такого расчета показаны на рис. 4.41, где представлены сдвиги энергии основного состояния атома и ионов меди в зависимости от радиуса ячейки. Дальнейшее определение «эффективного» радиуса ячейки базируется на соотношении

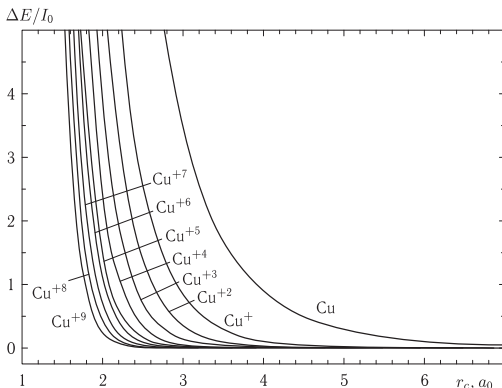


Рис. 4.41. Сдвиг энергии основных состояний атома меди и его ионов. Расчет методом Хартри–Фока

$\Delta E(r_i) = \text{const} \cdot I_i$ , где  $\Delta E(r_i)$  — сдвиг энергии основного состояния,  $I_i$  — соответствующий потенциал ионизации и  $r_i$  — радиус атомной ячейки. В данном случае принималось, что  $\text{const} = 1$ .

Боле простая процедура [190, 255] использует предположение о близости структуры атома к водородоподобной. В этом случае каждому иону ставится в соответствие характерный размер, связанный с потенциалом ионизации соотношением

$$r_i \approx r_0[(z_i + 1)I_0/I_i], \quad (4.228)$$

где  $r_0$ ,  $I_0$  — радиус и ионизационный потенциал атома,  $r_i$ ,  $I_i$  — то же для  $i$ -го иона,  $z_i$  — заряд иона. В реальных расчетах обе процедуры использовались только для определения отношения радиусов атома и остальных ионов. Опорная же величина атомного радиуса определялась в соответствии с так называемым правилом Ашкрофта–Лекнера [259], согласно которому соответствующий нормальной плотности оптимальный размер твердых шаров определяется из условия фиксированного значения параметра упаковки:

$$\nu \equiv 4\pi \sum n_i r_i^3 / 3 \approx 0,45. \quad (4.229)$$

Согласно [259], такой выбор приводит к наилучшему совпадению положения первого максимума парной корреляционной функции системы твердых шаров с экспериментально наблюдаемой величиной для целого ряда простых металлов в жидком состоянии. Вычисления в рамках приближения (4.223)–(4.230), проводившиеся ранее [249, 255], приводят к вполне приемлемому согласию с экспериментальными ударными адиабатами металлов при относительно больших скоростях ударных волн и, соответственно, высоких давлениях и температурах.

Учет короткодействующего отталкивания принципиален для достижения этого согласия. Однако проведенные расчеты выявили существование области относительно низких давлений [255], соответствующих малым скоростям ударных волн, в которой приближение (4.223)–(4.230) в принципе не позволяет получить решение уравнения Рэнкина–Гюгонио [260] для ударной адиабаты ни при каком наборе радиусов  $r_i$ . Это связано с тем, что приближение (4.223)–(4.229) не содержит механизма, учитывающего энергию связи, ответственную за существование конденсированного состояния вещества. Для улучшения экстраполяционных свойств приближения (4.223)–(4.229) при описании нижних участков ударных адиабат оно было дополнено членами, эффективно учитывающими наличие вышеупомянутой энергии связи:

$$\begin{aligned} \Delta F = \Delta U = -A \left( \sum N_i \right)^{1+\delta} \cdot V^{-\delta}; \quad \Delta p = \delta(\Delta U/V); \quad V^{1+\delta}; \\ \Delta \mu_i = -A(1+\delta)V^{-\delta} \left( \sum N_i \right)^{\delta}, \quad A, \delta = \text{const.} \end{aligned} \quad (4.230)$$

Поправки (4.230) не зависят от температуры. Выбор  $\delta = 1$  соответствует традиционной форме приближения Ван-дер-Ваальса. Выбор же  $\delta = 1/3$  считается более соответствующим «металлическому» (плазменному) типу связи конденсированного вещества. В этом случае суммирование ведется по всем тяжелым частицам, так что поправки (4.230) не сдвигают ионизационного равновесия. Согласно утверждению работ [261] именно такой показатель степени соответствует виду эффективного притяжения в «расширенных» металлах, т. е. металлах при промежуточных плотностях, соответствующих плотности в критической точке перехода газ-жидкость.

Результаты расчетов ударных адиабат для пористых никеля, меди, алюминия и железа с использованием описанной выше модели уравнения состояния (4.223)–(4.230) представлены на последующих рисунках.

На рисунке 4.42 приведены ударные адиабаты пористого никеля, рассчитывавшиеся ранее в работах [249, 255], и сопоставлявшиеся там с имевшимися ранее экспериментальными данными (см. [250]). Это сравнение пополнено в данной работе результатами дополнительных измерений для пористости  $m = 15$  и  $20$  [190], а также новейшими экспериментальными данными для высокопористых образцов ( $m = 20$  и  $28$ ) [268]. Обращает на себя внимание, что новые экспериментальные данные хорошо совпадают с результатами предыдущих расчетов. На рис. 4.42 также приведены результаты сравнения для адиабат с низкой пористостью (включая сплошную адиабату). Цель этого общего сравнения — показать, что квазихимическое представление даже в описанном выше сокращенном варианте вполне удовлетворительно описывает в целом весь набор экспериментально измеренных ударных адиабат никеля.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных для ударных адиабат железа приведено на рис. 4.43. Как и для никеля, для железа можно констатировать, что вполне удовлетворительное соответствие результатов теории и эксперимента при высоких пористостях (и максимально достигнутых степенях расширения первоначально конденсированного металла), постепенно ухудшается по мере продвижения в область все более и более плотной плазмы

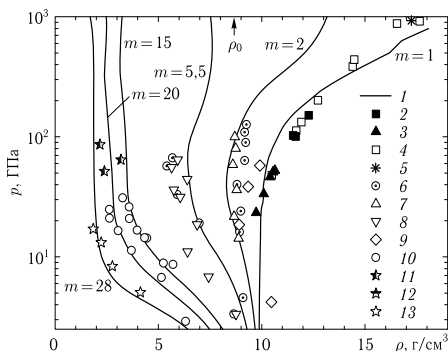


Рис. 4.42. Ударные адиабаты пористого никеля. Данные расчета: 1 — расчет согласно (4.223)–(4.230), суммирование в (4.230) по всем тяжелым частицам; Экспериментальные данные: 2 — [262], 3 — [263], 4 — [264], 5 — [178], 6 — [191] ( $m = 2$ ), 7 — [191] ( $m = 2,32$ ); 8 — [191] ( $m = 5,62$ ), 9 — [265], 10 — [192], 11 — [190], 12 — [268] ( $m = 20$ ), 13 — [268] ( $m = 28$ )

в опытах со сжатием низкопористых образцов. Заметим, что использованные в расчетной модели при описании новых экспериментальных данных параметры отталкивания (сочетание собственных размеров частиц) и притяжения, выбирались по той же схеме, что и в ранее выполненных расчетах [249, 255].

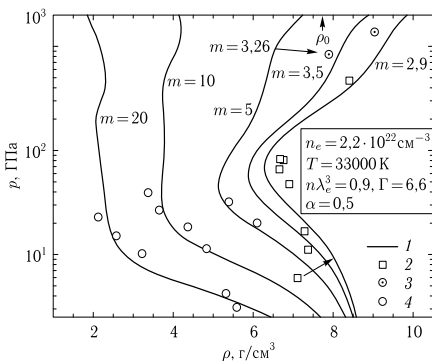


Рис. 4.43. Ударные адиабаты пористого железа. 1 — расчет согласно (4.223)–(4.230), суммирование в (4.230) по всем тяжелым частицам; 2 — экспериментальные данные [191] ( $m = 2,9$ ), 3 — экспериментальные данные [191]; 4 — [161]

В таблице 4.2 приведены значения радиусов атомов и ионов (в атомных единицах), использованных в расчетах данной работы для меди, никеля и железа.

Таблица 4.2. Значения радиусов атомов и ионов

$Z^i$	0	1	2	3	4	5	6	7
Cu	2,00	1,700	1,55	1,40	1,25	1,10	0,95	0,8
Ni	2,00	1,684	1,27	1,10	1,00	0,84	0,80	
Fe	2,05	2,00	1,58	1,18	1,075	0,978	0,904	

Аналогичные расчеты были проведены и для пористой меди. Сравнение расчетных и экспериментальных данных для ударно-сжатой меди и никеля представлено на рис. 4.44, 4.45, 4.46. Заметим, что на рис. 4.44, как и в предыдущих случаях, полученные прежде [249, 255] результаты дополнены новыми экспериментальными данными [190, 268]. В целом сравнение расчетных и экспериментальных данных для никеля, железа и меди показывает, что при использовании даже предельно упрощенного приближения, квазихимическое представление позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные по ударному сжатию образцов достаточно высокой пористости. Подтверждением этого является тот факт, что среди приведенных на рис. 4.45 результатов две экспериментальные точки, соответствующие максимальным

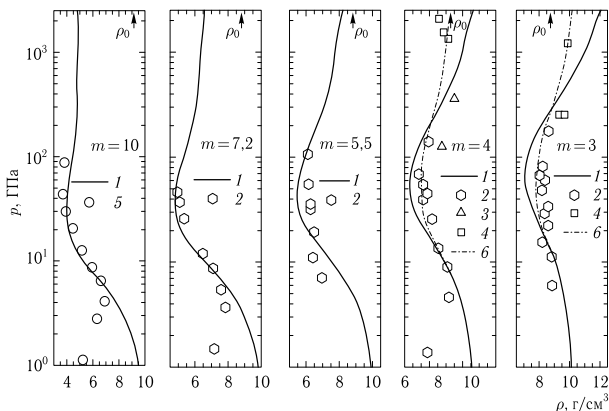


Рис. 4.44. Ударные адиабаты пористой меди. 1 — расчет согласно (4.223)–(4.230), суммирование в (4.230) по всем тяжелым частицам; 2 — эксперимент [191], 3 — эксперимент [178], 4 — эксперимент [179], 5 — эксперимент [190], 6 — расчет [176] по модели (4.223)–(4.230) с измененными радиусами атома и ионов ( $r_a = 2,0\alpha_0$ ,  $r_c(\text{Cu}^{+1}-\text{Cu}^{+3}) = 1,75\alpha_0$ )

давлениям на адиабатах с  $m = 15$  и  $m = 20$  были опубликованы [190, 268] после проведения основной процедуры расчета ударных адиабат пористого никеля, результаты которого представлены на рис. 4.42, 4.45, 4.46.

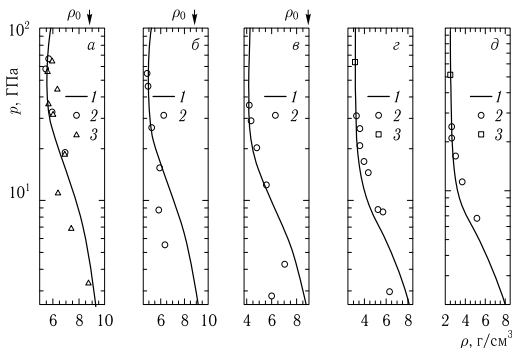


Рис. 4.45. Ударные адиабаты высокопористого никеля ( $m \gg 1$ ) [189]: а)  $m = 5,45$ ; б)  $m = 7,2$ ; в)  $m = 10$ ; г)  $m = 15$ ; д)  $m = 20$  ( $m = \rho_0/\rho_{00}$  — пористость образцов) 1 — вычисления по модели (4.223)–(4.224), суммирование в (4.230) по атомам; 2 — экспериментальные данные [191, 192], 3(a) — экспериментальные данные для  $m = 5,62$  [191, 192]; 4(г, д) — новые экспериментальные точки для  $m = 15$  и  $m = 20$  [190]

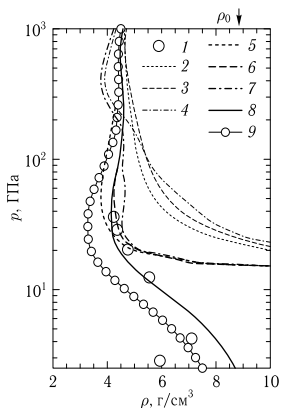


Рис. 4.46. Ударные адиабаты пористого никеля для  $m = \rho_0/\rho_{00} = 10$  [189]. Сравнение результатов вычислений с использованием различных приближений. 1 — экспериментальные данные [191, 192]; 2 — приближение идеальной плазмы (с учетом лишь основных состояний при вычислении статсумм); 3 — то же, что 2 но с учетом кулоновского взаимодействия согласно (4.225)–(4.227); 4 — то же, что 3, но статсуммы атомов и ионов вычислены по Планку–Ларкин; 5, 6, 7 — то же, что 2, 3, 4 но с учетом короткодействующего отталкивания в приближении смеси твердых сфер (4.225)–(4.229); 8 — то же, что 6, но с учетом дополнительного притяжения согласно (4.223)–(4.230) с  $\delta = 1$  (только для атомов); 9 — то же, что 8, но с увеличенными (+20%) радиусами атомов и ионов

Хорошее совпадение новых данных с результатами ранее проведенных расчетов служит дополнительным доказательством правильности исходных предположений, заложенных в процедуру расчета на основе обобщенной химической модели с целью расширения ее экстраполяционных возможностей. Следует подчеркнуть, что полученные дополнительно обсуждаемые экспериментальные данные соответствуют не только максимальным (для данного диапазона пористости никеля) давлениям ( $p \approx 50$  ГПа), но и, согласно настоящим расчетам, максимальным среди экспериментально достигнутых (для ударно сжатой плазмы никеля) температурам и степеням ионизации. В то же время, как уже было сказано выше, экстраполяционные возможности химической модели при одних и тех же давлениях постепенно ухудшаются по мере продвижения в область адиабат меньшей пористости и соответственно более высоких плотностей.

Итак можно констатировать удовлетворительное, в целом, соответствие теории и эксперимента. Вместе с тем обращает на себя внимание расхождение расчетных и экспериментальных ударных для случая адиабаты с  $m = 10$  (рис. 4.44) в верхней части экспериментально достигнутого диапазона давлений. Анализируя причину этого расхождения, следует принять во внимание очевидную упрощенность теоретической модели, описывающей взаимодействие в системе, и крайнюю чувствительность получаемых с ее помощью результатов к конкретному выбору сочетания собственных размеров частиц. Сказанное подтверждается результатами дополнительных расчетов, проведенных с несколько измененным (увеличенным) набором радиусов, также приведенным на рис. 4.47. Они показывают, что полученное ранее различие экспериментальных и расчетных данных лежит в пределах естественной неопределенности химической модели в рассматриваемой области параметров. В частности, ранее [176, 255] уже отмечалась особенность поведения ударных данных на адиабатах пористой меди с  $m = 3$  и  $m = 4$  (рис. 4.44), требующая для своего описания модельного уравнения состояния с эффективно более высокой «жесткостью» (кривая 6), нежели та, что дается выбранным в [249, 255] набором собственных размеров. Таким образом можно заключить, что модельное описание термодинамики ударно-сжатого вещества менее универсально и требует большей степени учета индивидуальных особенностей каждого конкретного металла (например, его электронной структуры), чем это предполагается при построении упрощенной методики.

Заметим, что упрощенная схема выбора относительного размера атома и ионов, дающая удовлетворительные результаты для описания ударно-сжатых пористых железа, никеля и меди не позволяет добиться сколько-нибудь приемлемых результатов при описании ударных адиабат пористого алюминия. Поэтому описанная выше упрощенная процедура определения отношения атомных и ионных радиусов была модернизирована. В качестве исходных данных для вычисления этого отношения использовались результаты расчета их электронной структуры методом Хартри–Фока (см. главу 3). При этом вычислялся средний радиус по всем электронным оболочкам с использованием их чисел заполнения  $g_{nl}$  и радиальных волновых функций  $f_{nl}(r)$  для атома

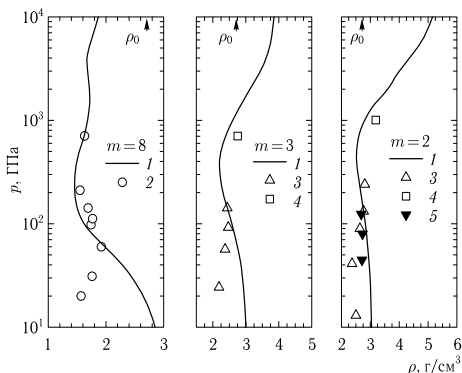


Рис. 4.47. Ударные адиабаты пористого алюминия ( $m \equiv \rho_0/\rho_{00}$  — исходная пористость экспериментальных образцов) 1 — вычисления согласно модели (4.223)–(4.231), (4.231). Суммирование в (4.230) по атомам; 2 — эксперимент [268]; 3 — эксперимент [267]; 4 — эксперимент [178]; 5 — эксперимент [234]

и всех ионов:

$$\langle r \rangle = \sum_{nl} \int_0^{\infty} r q_{nl} f_{nl}^2(r) dr. \quad (4.231)$$

Отношения атомных и ионных радиусов, которые были получены с использованием (4.231) применялись в качестве исходных параметров в термодинамической модели (4.223)–(4.230).

Заключая эту главу следует отметить, что современные модели динамики неидеальной плазмы достигли сегодня достаточного уровня совершенства, сделав доступными термодинамическое описание состояний с чрезвычайно высокими (концентрационными, твердотельными) плотностями и ультравысокими давлениями мегабарного-гигабарного диапазона.

### Список литературы

1. Фортон В. Е. Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
2. Фортон В. Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
3. Норман Г. Э., Старостин А. Н. // ТВТ. — 1970. — Т. 8. — С. 413.
4. Эбелинг В., Крефт В., Крем Д. Теория связанных состояний и поляризационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир, 1979.
5. Теплофизические свойства горячей плотной плазмы / Эбелинг В., Ферстер А., Фортон В., Грязнов В., Полищук А. — Москва, Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2007.

6. Теплофизические свойства рабочих сред газозафазного ядерного реактора / *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Красников Ю. Г. и др.* — М.: Атомиздат, 1980.
7. *Форттов В., Якубов И. Т.* Физика неидеальной плазмы. — Черногоровка: ИХФЧ РАН, 1984.
8. *DeWitt H. E.* Asymptotic form of the classical one-component plasma fluid equation of state // *Phys. Rev. A.* — 1976. — V. 14, No. 3. — P. 1290.
9. *Hubbard W. B., deWitt H. E.* Statistical mechanics of light elements at high pressure. VII — A perturbative free energy for arbitrary mixtures of H and He // *Astrophys. J.* — 1985. — P. 388.
10. *Ross M., Ree F. H., Young D. A.* // *J. Chem. Phys.* — 1983. — V. 79. — P. 1487.
11. *Rogers F. J., Wilson B. G., Iglesias C. A.* Parametric potential method for generating atomic data // *Phys. Rev. A.* — 1988. — V. 38, No. 10. — P. 5007.
12. *March N. H., Tosi M. P.* Coulomb Liquids. — London: Academic Press, 1984.
13. *McMahan A. K., Skriver H. L., Johansson B.* The *s-d* transition in compressed lanthanum // *Phys. Rev. B.* — 1981. — V. 23, No. 10. — P. 5016.
14. *Young D. A., McMahan A. K., Ross M.* Equation of state and melting curve of helium to very high pressure // *Phys. Rev. B.* — 1981. — V. 24, No. 9. — P. 5119.
15. *Meyer-ter Vehn J., Zittel W.* Electronic structure of matter at high compression: Isostructural transitions and approach of the Fermi-gas limit // *Phys. Rev. B.* — 1988. — V. 37, No. 15. — P. 8674.
16. *Ichimaru S.* // *Rev. Mod. Phys.* — 1982. — V. 54. — P. 1017.
17. *Калиткин Н. Н.* Квазизонное уравнение состояния // Математическое моделирование. — 1989. — Т. 1. — С. 64.
18. *Ebeling W., Kraeft W.-D., Kremp D.* Theory of bound states and ionization equilibrium in plasmas and solids. — Berlin: Akademie-Verlag, 1976.
19. Electron Correlations at Metallic Densities / *Singwi K. S., Tosi M. P., Land R. H., Sjölander A.* // *Phys. Rev.* — 1968. — V. 176, No. 2. — P. 589.
20. *Кржижиц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В.* Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3.
21. *Ломакин Б. Н., Форттов В. Е.* Уравнение состояния неидеальной цезиевой плазмы // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 63, № 7. — С. 1972.
22. *Никифоров А. Ф., Орлов Н. Ю., Уваров В. Б.* Препринт ИПМ АН СССР 114. — М.: ИПМ АН СССР, 1982.
23. *Rozsnyai B. F.* Relativistic Hartree-Fock-Slater Calculations for Arbitrary Temperature and Matter Density // *Phys. Rev. A.* — 1972. — V. 5, No. 3. — P. 1137.
24. *Синько Г. В.* // ТВТ. — 1983. — С. 1041.
25. *Brush S. G., Sahlin H. L., Teller E.* // *J. Chem. Phys.* — 1966. — V. 45. — P. 2102.
26. *Копышев В. П.* // Числ. методы мех. спл. сред. — 1977. — Т. 8. — С. 54.
27. *Kraeft W.-D., Ebeling W., Kremp D., Röpke G.* // *Ann. Physik (Leipzig).* — 1988. — V. 500. — P. 429.
28. *Марч Н., Янг У., Сампантхар С.* Проблема многих тел в квантовой механике. — М.: Мир, 1969.
29. Strongly Coupled Plasmas / Ed. by G. Kalman. — N.Y.: Plenum Press, 1978. — V. 36 of NATO/Advanced Study Institutes Series. Ser. B.
30. *Baus M., Hansen J.-P.* Statistical mechanics of simple coulomb systems // *Phys. Rep.* — 1980. — V. 59, No. 1. — P. 1.
31. *Springer J. F., Pokrant M. A., Stevens J. F. A.* Integral equation solutions for the classical electron gas // *J. Chem. Phys.* — 1973. — V. 58, No. 11. — P. 4863.
32. *Brush S. G., Sahlin H. L., Teller E.* Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I // *J. Chem. Phys.* — 1966. — V. 45, No. 6. — P. 2102.

33. *Hansen J. P.* Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-Component Plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 6. — P. 3096.
34. *Slattery W. L., Doolen G. D., DeWitt H. E.* Improved equation of state for the classical one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1980. — V. 21, No. 6. — P. 2087.
35. *Slattery W. L., Doolen G. D., DeWitt H. E.*  $N$  dependence in the classical one-component plasma Monte Carlo calculations // *Phys. Rev. A.* — 1982. — V. 26, No. 4. — P. 2255.
36. *Hubbard W. B., Slattery W. L.* Statistical Mechanics of Light Elements at High Pressure. I. Theory and Results for Metallic Hydrogen with Simple Screening // *Astrophys. J.* — 1971. — V. 168. — P. 131.
37. *Ross M., Seale D.* Perturbation approximation to the screened Coulomb gas // *Phys. Rev. A.* — 1974. — V. 9, No. 1. — P. 396.
38. *Stroud D., Ashcroft N. W.* Comment on the thermodynamics of a classical one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1976. — V. 13, No. 4. — P. 1660.
39. *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л.* // Численные методы механики сплошной среды. — 1973. — Т. 4, № 5. — С. 166.
40. *Lebowitz J. L., Lieb E. H.* Existence of Thermodynamics for Real Matter with Coulomb Forces // *Phys. Rev. Lett.* — 1969. — V. 22, No. 13. — P. 631.
41. *Pollock E. L., Hansen J. P.* Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One-Component Plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 6. — P. 3110.
42. *Абрикосов А. А.* Некоторые свойства сильно сжатого вещества. I // *ЖЭТФ.* — 1960. — Т. 39, № 6. — С. 1797.
43. *Абрикосов А. А.* К теории сильно сжатого вещества. II // *ЖЭТФ.* — 1961. — Т. 41, № 2. — С. 569.
44. *Wigner E. P.* // *Trans. Farad. Soc.* — 1938. — V. 34. — P. 678.
45. *Utsumi K., Ichimaru S.* Dielectric formulation of strongly coupled electron liquids at metallic densities. IV. Static properties in the low-density domain and the Wigner crystallization // *Phys. Rev. B.* — 1981. — V. 24, No. 6. — P. 3220.
46. *Ceperley D.* Ground state of the fermion one-component plasma: A Monte Carlo study in two and three dimensions // *Phys. Rev. B.* — 1978. — V. 18, No. 7. — P. 3126.
47. *Ceperley D. M., Alder B. J.* Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method // *Phys. Rev. Lett.* — 1980. — V. 45, No. 7. — P. 566.
48. *Долгов О. В., Максимов Е. Г.* Эффекты локального поля и нарушение соотношений Крамерса–Кронига для диэлектрической проницаемости // *УФН.* — 1981. — Т. 135, No. 11. — С. 441.
49. *Иосилевский И. Л.* // Уравнение состояния в экстремальных условиях / Под ред. Г. В. Гадяка. — ИТПМ СО АН СССР, 1981. — С. 20.
50. *Cook M. A., Keyes R. T., Udy L. L.* Propagation Characteristics of Detonation-Generated Plasmas // *J. Appl. Phys.* — 1959. — V. 30, No. 12. — P. 1881.
51. *Фортов В. Е., Мусянков С. И., Якушев В. В., Дремин А. Н.* // *ТВТ.* — 1974. — Т. 12. — С. 957.
52. *Горбченко В. Д., Максимов Е. Г.* Диэлектрическая проницаемость взаимодействующего электронного газа // *УФН.* — 1980. — Т. 130, № 1. — С. 65.
53. *Красников Ю. Г., Кучеренко В. И.* // *ТВТ.* — 1978. — Т. 16. — С. 43.
54. *Rogers F. J.* Equation of state of dense, partially degenerate, reacting plasmas // *Phys. Rev. A.* — 1981. — V. 24, No. 3. — P. 1531.

55. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. В 2-х ч. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
56. Huff V. N., Gordon S., Morell V. Z.: Tech. Rep. 1037: NASA Report, 1951.
57. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / Алемасов В. Е., Дрегалин А. Ф., Тишин А. П., Худяков В. А. — М.: ВИНТИ, 1971.
58. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. — М.: Наука, 1978. — Т. 1.
59. Якуб Е. Уравнение состояния ударно сжатого жидкого водорода // ТВТ. — 1990. — V. 28. — P. 664.
60. Yakub E. Diatomic fluids at high pressures and temperatures: a non-empirical approach // Physica B: Condensed Matter. — 1999. — V. 265, No. 1-4. — P. 31.
61. Фортон В., Храпак А., Якубов И. Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
62. Brinkley S. // J. Chem. Phys. — 1947. — V. 15. — P. 107.
63. Волков Л. П., Волошин Н. П., Владимиров А. С. и др. Ударная сжимаемость алюминия при давлении 10 Мбар. // Письма в ЖЭТФ. — 1980. — Т. 31. — С. 623.
64. Старостин А. Н., Перух В. К. Сходящееся уравнение состояния слабонеидеальной плазмы водорода без таинств // ЖЭТФ. — 2005. — Т. 127, № 1. — С. 186.
65. Saha M. LIII. Ionization in the solar chromosphere // Philosophical Magazine Series 6. — 1920. — V. 40, No. 238. — P. 472.
66. Saha M. On a physical theory of stellar spectra // Proc. R. Soc. Lond. A. — 1921. — V. 99, No. 697. — P. 135.
67. Ragan III C. E. Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // Phys. Rev. A. — 1982. — V. 25, No. 6. — P. 3360.
68. Бриллюэн Л. Квантовая статистика. — Харьков, Киев: ОНТИ, государственное НКТП Научно-техническое издательство Украины, 1934.
69. Эбелинг В., Крефт В., Кремн Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир, 1979. — (перевод с англ. под ред. Г. Э. Нормана).
70. Пайерлс Р. Сюрпризы в теоретической физике. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988.
71. Квантовая статистика систем заряженных частиц / Крефт В.-Д., Кремн Д., Эбелинг В., Пенке Г. — М.: Мир, 1988.
72. Fermi E. Über die Wahrscheinlichkeit der Quantenzustände // Z. Phys. — 1924. — V. 26. — P. 54.
73. Planck M. Zur Quantenstatistik des Bohrschen Atommodells // Ann. der Phys. — 1924. — V. 75. — P. 673.
74. Mott N. F. Electrons in transition metals // Advances in Physics. — 1964. — V. 13, No. 51. — P. 325.
75. Inglis D. R., Teller E. Ionic depression of series limits in one-electron spectra // Astrophys. J. — 1939. — V. 90. — P. 439.
76. Margenau H., Lewis M. Structure of spectral lines from plasmas // Rev. Mod. Phys. — 1959. — V. 31, No. 3. — P. 569.
77. Unsöld A. Zur Berechnung der Zustandsummen für Atome und Ionen in einem teilweise ionisierten Gas. Mit 2 Textabbildungen // Z. Astrophys. — 1948. — V. 24. — P. 355.
78. Ecker G., Kröll W. Lowering of the ionization energy for a plasma in thermodynamic equilibrium // Phys. Fluids. — 1963. — V. 6, No. 1. — P. 62.

79. Ларкин А. И. Термодинамические функции низкотемпературной плазмы // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 1896.
80. Веденов А. А., Ларкин А. И. Уравнение состояния плазмы // ЖЭТФ. — 1959. — Т. 36. — С. 1133.
81. Кудрин Л. П., Тарасов И. А. // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 43. — С. 1504.
82. Трубников Б. А., Елесин В. Ф. Квантовые корреляционные функции в максвелловской плазме // ЖЭТФ. — 19. — Т. 47, № 4(10). — Р. 1279.
83. Красников Ю. Г. К термодинамике плотной плазмы // ЖЭТФ. — 1967. — V. 53. — Р. 2223.
84. Копышев В. П. Второй вириальный коэффициент плазмы // ЖЭТФ. — 1968. — Т. 55. — С. 1304.
85. Ebeling W. Statistische thermodynamik der gebundenen zustande in plasmen // Annalen der Physik. — 1967. — V. 474, No. 1–2. — P. 104.
86. Rogers F. J. Phase shifts of the static screened coulomb potential // Phys. Rev. A. — 1971. — Sep. — V. 4, No. 3. — P. 1145.
87. Копышев В. П., Медведев А. Б., Хрусталеv В. В. Термодинамика низкотемпературной плазмы. два аспекта // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / под ред. ак. В. Е. Фортова, Сер. Б., т. III-I, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы» / Старостин А. Н., Иосилевский И. Л. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — Р. 59.
88. Красников Ю. Г. Основы термодинамики плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы, под ред. ак. В. Е. Фортова, Сер. Б. т. III-I, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы». / Старостин А. Н., Иосилевский И. Л. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — Р. 1.
89. Alastuey A., Perez A. Virial expansion of the equation of state of a quantum plasma // EPL (Europhysics Letters). — 1992. — V. 20, No. 1. — P. 19.
90. Alastuey A., Cornu F., Perez A. Virial expansions for quantum plasmas: Diagrammatic resummations // Phys. Rev. E. — 1994. — Feb. — V. 49, No. 2. — P. 1077.
91. Alastuey A., Cornu F., Perez A. Virial expansions for quantum plasmas: Maxwell-boltzmann statistics // Phys. Rev. E. — 1995. — Mar. — V. 51, No. 3. — P. 1725.
92. Alastuey A., Perez A. Virial expansions for quantum plasmas: Fermi-bose statistics // Phys. Rev. E. — 1996. — Jun. — V. 53, No. 6. — P. 5714.
93. The solar-interior equation of state with the path-integral formalism / Perez A., Mussack K., Däppen W., Mao D. // A&A. — 2009. — V. 505, No. 2. — P. 735.
94. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Термодинамика сильно неидеальной плазмы // ТВТ. — 1970. — Т. 8, № 2. — С. 413.
95. Starostin A. N., Roerich V. C., More R. M. How correct is the EOS of weakly nonideal hydrogen plasmas? // Contrib. Plasma Phys. — 2003. — V. 43, No. 5-6. — P. 369.
96. Старостин А. Н., Перих В. К. Сходящееся уравнение состояния слабонеидеальной плазмы водорода без таинств // ЖЭТФ. — 2005. — Т. 127, № 1. — С. 186.
97. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. — М.: Наука, 1979.
98. Starostin A. N., Roerich V. C. Equation of state of weakly nonideal plasmas and electroneutrality condition // J. Phys. A: Math. Gen. — 2006. — V. 39, No. 17. — P. 4431.
99. Воробьев В. С., Хомкин А. Л. Метод канонического преобразования в термодинамике частично ионизованной плазмы // ТМФ. — 1971. — V. 8. — P. 109.

100. Боголюбов Н. Н. К теории сверхтекучести // Изв. АН СССР. — 1947. — V. 11, № 1. — P. 77.
101. Moore C. E., Minnaert M. G. J., Houtgast J. The solar spectrum 2935 Å to 8770 Å. — Washington: US Government Printing Office, 1966. — V. 61 of NBS Monograph.
102. Карпенко А. С., Маркевич А. М., Рябинин Ю. Н. // ЖЭТФ. — 1952. — Т. 23. — С. 468
103. Тиман Б. А. Влияние взаимодействия частиц на ионизационное равновесие в термически ионизованном газе // ЖЭТФ. — 1953. — Т. 25, № 6(12). — С. 733.
104. Ликальтер А. А. Взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 56, № 1. — С. 240.
105. Алексеев В. А. Электропроводность цезия при температурах и давлениях выше критических // ТВТ. — 1968. — Т. 6, № 6. — С. 961.
106. Renkert H., Hensel F., Franck E. U. Metal-nonmetal transition in dense cesium vapour // Phys. Lett. A. — 1969. — V. 30, No. 9. — P. 494.
107. Алексеев В. А., Веденов А. А. Об электропроводности плотных паров цезия // УФН. — 1970. — Т. 102, № 12. — С. 665.
108. Mott N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals // Proceedings of the Physical Society. Section A. — 1949. — V. 62, No. 7. — P. 416.
109. Зельдович Я. Б., Ландау Л. Д. О соотношении между жидким и газообразным состоянием у металлов // ЖЭТФ. — 1944. — Т. 14. — С. 32.
110. Электропроводность и плотность металлического (ртутного) пара / Кикоин И. К., Сенченков А. П., Гельман Э. Б. и др. // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 49. — С. 124.
111. Franck E. U., Hensel F. Metallic conductance of supercritical mercury gas at high pressures // Phys. Rev. — 1966. — Jul. — V. 147, No. 1. — P. 109.
112. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // ТВТ. — 1968. — Т. 6, № 3. — С. 410.
113. Иосилевский И. Л., Старостин А. Н. Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том № 1 / Под ред. В. Е. Фортова. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. — P. 327.
114. Ebeling W., Norman G. Coulombic phase transitions in dense plasmas // Journal of Statistical Physics. — 2003. — V. 110. — P. 861.
115. Алексеев В. А., Велихов Е. П., Лопанцева Г. Б. // МГД генераторы. — 1967. — Т. 1. — С. 17.
116. Alekseev V. A., Velikhov E. P., Lopantseva G. B. // Electricity from MHD. — 1966. — P. 617.
117. Saumon D., Chabrier G. Fluid hydrogen at high density: The plasma phase transition // Phys. Rev. Lett. — 1989. — May. — V. 62, No. 20. — P. 2397.
118. Иосилевский И. Л. Эффекты неидеальности в термодинамике низкотемпературной плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. ак. В. Е. Фортова, Сер. Б., Т. III-I, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы». — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — P. 349.
119. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортов В. Е. Термодинамические свойства ударно сжатой плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. ак. В. Е. Фортова, Сер. Б., Т. III-I, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы». — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — P. 111.
120. Ликальтер А. А. Плазма металлов и полупроводников в окрестности критической точки конденсации // Энциклопедия низкотемпературной плазмы /

- Под ред. ак. В. Е. Фортова, Сер. Б., Т. III-I, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы». — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — Р. 140.
121. Phase transition in a strongly nonideal deuterium plasma generated by quasi-isentropic compression at megabar pressures / *Fortov V. E., Ilkaev R. I., Arinin V. A. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Oct. — V. 99, No. 18. — P. 185001.
  122. *Matsubara T.* A new approach to quantum-statistical mechanics // *Progr. Theor. Phys.* — 1955. — V. 14. — P. 351.
  123. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Физматгиз, 1962.
  124. *Kadanoff L., Baym G.* Quantum Statistical Mechanics. — N.Y.: W A Benjamin, Inc., 1962.
  125. *Келдыш Л. В.* Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ.* — 1964. — Т. 47, № 4. — С. 1515.
  126. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
  127. *Галицкий В. М.* Энергетический спектр неидеального ферми-газа // *ЖЭТФ.* — 1958. — Т. 34, № 1. — С. 151.
  128. *Montroll E. W., Ward J. C.* Quantum statistics of interacting particles; general theory and some remarks on properties of an electron gas // *Phys. Fluids.* — 1958. — V. 1. — P. 55.
  129. *DeWitt H. E.* Evaluation of the quantum-mechanical ring sum with Boltzmann statistics // *J. Math. Phys.* — 1962. — V. 3. — P. 1216.
  130. *Debye P., Hückel E.* Zur Theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunkterniedrigung und verwandte Erscheinungen (on the theory of electrolytes. i. freezing point depression and related phenomena) // *Physikalische Zeitschrift.* — 1923. — V. 24, No. 9. — P. 185.
  131. *Ebeling W., Hoffmann H. J., Kelbg G.* Quantenstatistik des Hochtemperatur-Plasmas in thermodynamischen Gleichgewicht // *Beitr. Plasmaphys.* — 1967. — V. 7. — P. 233.
  132. *Ebeling W., Kelbg G., Rohde K.* Binäre Slatersummen und Verteilungsfunktionen für quantenstatistische Systeme mit Coulomb-Wechselwirkung I. // *Ann. der Phys.* — 1968. — V. 21, No. 5-6. — P. 235.
  133. *Фрадкин Е. С.* Метод функций Грина в теории квантованных полей и в квантовой статистике (дисс. д.ф.-м.н.) // *Квантовая теория поля и гидродинамика.* — М.: Наука, 1965. — Т. 29. — С. 5.
  134. *Starostin A. N.* // IX Intern. Conf. on Phenom. in Ionized Gases. — Bucharest: 1969. — P. 366.
  135. *Uhlenbeck G. E., Beth E.* The quantum theory of the non-ideal gas. I. Deviations from the classical theory // *Physica.* — 1936. — V. 3. — P. 729.
  136. *Beth E., Uhlenbeck G. E.* The quantum theory of the non-ideal gas. II: Behaviour at low temperatures // *Physica, The Hague.* — 1937. — V. 4. — P. 915.
  137. *Фок В. А.* // *Изв. АН СССР, отд. матем. и естеств. наук.* — 1935. — Т. 2. — С. 169.
  138. The influence of electron degeneracy on the contribution of bound states to the non-ideal hydrogen plasma eos / *Starostin A. N., Roerich V. C., Gryaznov V. K. et al.* // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2009. — V. 42. — P. 214009.
  139. *Galitskii V. M.* The energy spectrum of a non-ideal Fermi gas // *Sov. Phys. JETP.* — 1958. — V. 7. — P. 104.
  140. Thermodynamics and phase transitions in dense hydrogen — the role of bound state energy shifts / *Ebeling W., Redmer R., Reinholz H., Röpke G.* // *Contrib. Plasma Phys.* — 2008. — V. 48, No. 9-10. — P. 670.

141. *Starostin A. N., Roerich V. C.* Bound states in nonideal plasmas: formulation of the partition function and application to the solar interior // *Plasma Sources Sci. Technol.* — 2006. — V. 15, No. 3. — P. 410.
142. *Mihalas D., Däppen W., Hummer D. G.* The equation of state for stellar envelopes II. Algorithm and selected results // *Astrophys. J.* — 1988. — V. 331. — P. 815.
143. *Sobelman I. I., Vainshtein L. A., Yukov E. A.* Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines. — Berlin: Springer, 1981.
144. *Starostin A. N., Rörich V. C.* A converging equation of state of a weakly nonideal hydrogen plasma without mystery // *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* — 2005. — V. 127, No. 1. — P. 186. — [JETP. — 2005. — V. 100, No. 1. — P. 165].
145. Low-frequency electric microfield distributions in plasmas / *Iglesias C. A., DeWitt H. E., Lebowitz J. L., MacGowan D.* // *Phys. Rev. A.* — 1985. — V. 31, No. 3. — P. 1698.
146. *Ахизер А. И., Берестецкий В. Б.* Квантовая электродинамика. — 4-е изд. — М.: Наука, 1981.
147. *Ebeling W., Kraeft W.-D., Kremp D.* Theory of Bound States and Ionisation Equilibrium in Plasmas and Solids. — Berlin: Akademie-Verlag, 1976.
148. *DeWitt H. E.* Thermodynamic functions of a partially degenerate, fully ionized gas // *Journal of Nuclear Energy, Part C, Plasma Physics, Accelerators, Thermonuclear Research.* — 1961. — V. 2, No. 1. — P. 27.
149. *Земцов Ю. К., Сечин А. Ю., Старостин А. Н.* Перенос резонансного излучения в плотных диспергирующих средах // *ЖЭТФ.* — 1996. — Т. 110, № 5. — С. 1654.
150. An introduction to helioseismology // *Variable Stars as Important Astrophysical Tools, Proc. NATO Advanced Study Institute, Cesme, Turkey, Aug. 30 – Sept. 11 1998* / Ed. by C. Ibanoglu. — Dordrecht: Kluwer Academic, 2000. — P. 59.
151. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982.
152. *Градштейн И. С., Рыжик И. М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. — М.: Наука, 1971.
153. *Rogers F. J., Witt H. E. D.* Statistical mechanics of reacting Coulomb gases // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 2. — P. 1061.
154. *Rogers F. J.* Statistical mechanics of Coulomb gases of arbitrary charge // *Phys. Rev. A.* — 1974. — V. 10, No. 6. — P. 2441.
155. *Фаддеев Л. Д.* Теория рассеяния для системы трех частиц // *ЖЭТФ.* — 1960. — Т. 39. — С. 1459.
156. *Starostin A. N., Rörich V. C.* Account of atomic and molecular contributions in the equation-of-state for a weakly non-ideal hydrogen plasmas // *Contributions to Plasma Physics.* — 2010. — V. 50, No. 1. — P. 88.
157. *Graboske H. C., Harwood D. J., Rogers F. J.* Thermodynamic Properties of Nonideal Gases. I. Free-Energy Minimization Method // *Phys. Rev.* — 1969. — V. 186, No. 1. — P. 210.
158. *Хартри Д.* Расчеты атомных структур. — М.: ИИЛ, 1960.
159. *Zuliëcke L.* Grundlagen und allgemeine Methoden. — Berlin: Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1973. — V. 1 of *Quantenchemie – Ein Lehrgang.*
160. *Zuliëcke L.* Atombau, Chemische Bindung und molekulare Wechselwirkungen. — Berlin: Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1985. — V. 2 of *Quantenchemie – Ein Lehrgang.*
161. *Грязнов В. К., Иванова А. Н., Гуцев Г. Л. и др.* // *Журн. структ. хим.* — 1989. — Т. 30. — С. 132.

162. Глембоцкий Н., Петквичюс Ю. Уравнения Хартри–Фока с учетом корреляции // Лит. физ. сб. — 1973. — Т. 13. — С. 51.
163. Carnahan N. F., Starling K. E. // J. Chem. Phys. — 1969. — V. 51. — P. 635.
164. Бушман А. В., Ломакин Б. Н., Сеченов В. А. и др. Термодинамика неидеальной плазмы цезия // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69. — С. 1624.
165. Ломакин Б. Н., Фортвов В. Е. Уравнения состояния неидеальной цезиевой плазмы // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 63. — С. 92.
166. Беспалов В. Е., Грязнов В. К., Дремин А. Н., Фортвов В. Е. Динамическое сжатие неидеальной плазмы аргона // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69, № 6. — С. 2059.
167. Фортвов В. Е., Леонтьев А. А., Дремин А. Н., Грязнов В. К. Генерация неидеальной плазмы мощными ударными волнами // ЖЭТФ. — 1976. — Т. 71, № 1. — С. 225.
168. Грязнов В. К., Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н. и др. Термодинамические свойства неидеальной плазмы аргона и ксенона // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 78, № 2. — С. 573.
169. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Термодинамика сильно неидеальной плазмы // ТВТ. — 1970. — Т. 8. — С. 413.
170. Ликальтер А. А. Взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 56. — С. 240.
171. Иосилевский И. Л. Об уравнении состояния неидеальной плазмы // ТВТ. — 1980. — Т. 18, № 3. — С. 447.
172. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — Наука, 1972.
173. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортвов В. Е. асчет ударных адиабат аргона и ксенона // ПМТФ. — 1973. — Т. 3. — С. 70.
174. Гирифельдер Д., Кертис К., Берд Р. Молекулярная теория жидкостей и газов. — М.: ИИЛ, 1961.
175. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas / Ebeling V., Foerster A., Fortov V. et al. // Teubner Verlagsgesellschaft, Berlin-Stuttgart. — 1991.
176. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортвов В. Е. Термодинамика сильно сжатой плазмы мегабарного диапазона давлений // Письма в ЖТФ. — 1982. — Т. 8. — С. 1378.
177. Грязнов В. К., Фортвов В. Е. Термодинамика плазмы алюминия при ультравысоких плотностях энергии // ТВТ. — 1987. — Т. 25. — С. 1208.
178. Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42. — С. 686.
179. Зубарев В. Н., Подурец М. А., Попов Л. В. и др. // Детонация. — Черногловка: ИХФЧ РАН, 1978. — С. 61.
180. Экспериментальное подтверждение оболочечных эффектов на ударных адиабатах алюминия и свинца / Аврорин Е. Н., Водолага В. К., Волошин Н. П. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 1986. — Т. 43. — С. 241.
181. Симоненко В. А., Волошин Н. П., Владимиров А. С. и др. // ЖЭТФ. — 1985. — Т. 88. — С. 1452.
182. Ларкин А. И. Термодинамические функции низкотемпературной плазмы // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 1896.
183. Калиткин Н. Н. Модель атома Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 1534.

184. *Gryaznov V. K., Iosilevskii I. L., Fortov V. E.* Thermodynamic Properties of Dense Plasma of Shock—Compressed Metals // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — V. 39, No. 1-2. — P. 89.
185. Theory of the aluminum shock equation of state to 104 Mbar / *Young D. A., Wolford J. K., Rogers F. J., Holian K. S.* // *Phys. Lett. A.* — 1985. — V. 108, No. 3. — P. 157.
186. *Новиков В. Г.* Препринт ИПМ АН СССР 133. — ИПМ АН СССР, 1985.
187. *Альтшулер Л. В., Мусеев Л. В. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1968. — Т. 54. — С. 785.
188. Determination of the shock compressibility of iron at pressures up to 10 TPa (100 Mbar) / *Trunin R. F., Podurets M. A., Popov L. V. et al.* // *JETP.* — 1993. — V. 103, No. 2129.
189. *Gryaznov V. K., Iosilevski I. L., Fortov V. E.* Calculation of Porous Metal Hugoniot // *Physics of Strongly Coupled Plasmas* / Ed. by W. D. Kraeft, M. Schlages. — Singapore: World Scientific, 1996. — P. 277.
190. *Грязнов В. К., Жерноклетов М. В., Иосилевский И. Л. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1998. — Т. 114, № 4. — С. 1242.
191. *Трунин Р. Ф., Симаков Г. В., Суцулов Ю. Н. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1989. — Т. 96, № 3. — С. 1024.
192. *Трунин Р. Ф., Симаков Г. В.* // *ЖЭТФ.* — 1993. — Т. 103. — С. 2180.
193. *Аюков С. В., Батурин В. А., Грязнов В. К. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* — 2004. — Т. 80. — С. 163.
194. Solar plasma: calculation of thermodynamic functions and equation of state / *Gryaznov V. K., Ayukov S. V., Baturin V. A. et al.* // *J. Phys. A.* — 2006. — V. 39, No. 17. — P. 4459.
195. Absolute Equation of State Measurements on Shocked Liquid Deuterium up to 200 GPa (2 Mbar) / *Da Silva L. B., Celliers P., Collins G. W. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — V. 78, No. 3. — P. 483.
196. Ударное сжатие и яркостная температура фронта ударной волны в аргоне. Электронная экранировка излучения / *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1978. — Т. 75. — С. 1683.
197. *Белов С. И., Борисков Г. В., Быков А. И. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* — 2002. — Т. 76. — С. 433.
198. Reflected Shock Experiments on the Equation-of-State Properties of Liquid Deuterium at 100–600 GPa (1–6 Mbar) / *Mostovych A. N., Chan Y., Lehecha T. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 85, No. 18. — P. 3870.
199. *Holmes N. C., Ross M., Nellis W. J.* Temperature measurements and dissociation of shock-compressed liquid deuterium and hydrogen // *Phys. Rev. B.* — 1995. — V. 52, No. 22. — P. 15835.
200. *Фортвов В. Е., Терновой В. Я., Жерноклетов М. В. и др.* // *ЖЭТФ.* — 2003. — Т. 124. — С. 288.
201. Equation of State Measurements in Liquid Deuterium to 70 GPa / *Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — V. 87, No. 22. — P. 225501.
202. Use of a Wave Reverberation Technique to Infer the Density Compression of Shocked Liquid Deuterium to 75 GPa / *Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — V. 90, No. 3. — P. 035505.
203. Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques / *Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E. et al.* // *Phys. Rev. B.* — 2004. — V. 69, No. 14. — P. 144209.

204. Ударно-волновое сжатие жидкого дейтерия при давлении 120 ГПа / *Борисков Г. В., Быков А. И., Илькаев Р. И. и др.* // ДАН. — 2003. — Т. 392, № 6. — С. 755.
205. *Gryaznov V. K., Iosilevskiy I. L., Fortov V. E.* Thermodynamic Properties of Shock Compressed Plasmas Based on a Chemical Picture // High-Pressure Shock Compression of Solids VII Shock Waves and Extreme States of Matter / Ed. by V. E. Fortov, L. V. Al'tshuler, R. F. Trunin, A. I. Funtikov. — Springer-Verlag, 2004. — P. 437.
206. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* // ТВТ. — 1973. — Т. 11. — С. 992.
207. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* Парные корреляционные функции в псевдопотенциальной модели неидеальной плазмы // ТВТ. — 1974. — Т. 12, № 2. — С. 267.
208. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* Псевдопотенциальная модель неидеальной плазмы // ТВТ. — 1975. — Т. 13. — С. 712.
209. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* // ТВТ. — 1973. — Т. 13. — С. 913.
210. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* К статистической теории неидеальной плазмы // ТВТ. — 1972. — Т. 10, № 6. — С. 1160.
211. *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л.* Некоторые вопросы термодинамического расчета многокомпонентной неидеальной плазмы // Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы. — М.: Наука, 1976. — С. 25.
212. Термодинамика неидеальной плазмы цезия / *Бушман А. В., Ломакин Б. Н., Сеченов В. А. и др.* // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69, № 11. — С. 1624.
213. *Фортвов В. Е., Ломакин Б. Н., Красников Ю. Г.* // ТВТ. — 1971. — Т. 9, № 5. — С. 869.
214. *Зельдович Я. Б.* // ЖЭТФ. — 1957. — Т. 32. — С. 1577.
215. *Young D.* UCRL-52352: Tech. rep. — Univ. California: LLNL, 1977.
216. *Keeler R. K., Van Thiel M., Alder B. J.* // Physica. — 1965. — V. 31. — P. 1437.
217. *Nellis W. J., van Thiel M., Mitchell A. C.* Shock Compression of Liquid Xenon to 130 GPa (1.3 Mbar) // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 48, No. 12. — P. 816.
218. *Urtin V. D., Mochalov M. A., Mikhailova O. L.* Liquid xenon study under shock and quasi-isentropic compression // High Pressure Research. — 1992. — V. 8. — P. 595.
219. *Radousky H. B., Ross M.* // Phys. Lett. A. — 1988. — V. 129. — P. 43.
220. Electrical conductivity of shock compressed Xenon / *Mintsev V. B., Ternovoi V. Y., Gryaznov V. K. et al.* // Shock Compression of Condensed Matter-1999 / Ed. by S. C. Shmidt, D. P. Dandekar, J. W. Forbes. — NY: Woolbury, 2000. — P. 987.
221. *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // ЖЭТФ. — 1985. — Т. 88. — С. 1271.
222. *Глуходедов В. Д., Киришинов С. И., Лебедева Т. С., Мочалов М. А.* // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 116. — С. 551.
223. Equation of State of the Hydrogen Plasma by Path Integral Monte Carlo Simulation / *Pierleoni C., Ceperley D. M., Bernu B., Magro W. R.* // Phys. Rev. Lett. — 1994. — V. 73, No. 16. — P. 2145.
224. Quantum molecular dynamics simulations of hot, dense hydrogen / *Collins L., Kwon I., Kress J. et al.* // Phys. Rev. E. — 1995. — V. 52, No. 6. — P. 6202.
225. *Knaup M., Reinhard P., Topffer C.* Wave Packet Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen Near the Transition to a Metallic Fluid // Contrib. Plasma Phys. — 1999. — V. 39, No. 1-2. — P. 57.

226. Kerley G. I. // A Theoretical Equation of State for Deuterium. NTIS Document No. LA-47766. — Springfield, VA: National Technical Information Service, 1972.
227. Equation of state for hydrogen below 10000 K: From the fluid to the plasma / Beule D., Ebeling W., Förster A. et al. // Phys. Rev. B. — 1999. — V. 59, No. 22. — P. 14177.
228. Ross M. Linear-mixing model for shock-compressed liquid deuterium // Phys. Rev. B. — 1998. — V. 58, No. 2. — P. 669.
229. Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений / Фортвов В., Терновой В., Жерноклетов М. и др. // ЖЭТФ. — 2003. — Т. 124, № 2. — С. 288.
230. Ree F., Ross M., Young D. // J. Chem. Phys. — 1983. — V. 79. — P. 1487.
231. Shock compression of liquid deuterium up to 109 GPa / Boriskov G. V., Bykov A. I., Il'kaev R. I. et al. // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 71, No. 9. — P. 092104.
232. Гришечкин С. К., Груздев С. К., Грязнов В. К. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80. — С. 452.
233. Фортвов В. Е. Динамические методы в физике плазмы // УФН. — 1982. — Т. 138, № 3. — С. 361.
234. Compendium of shock wave data, Livermore Lawrence Laboratory Report UCRL-50108 / Ed. by M. Van Thiel. — LLNL, 1977. — V. 1.
235. LASL Shock Hugoniot Data / Ed. by S. P. Marsh. — Berkeley-LA-London: University of California Press, 1980.
236. Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии / Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Трунин Р. Ф., Фортвов В. Е. — Черногловка: ИПХФ РАН, 1996.
237. Альтшулер Л. В. Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. — 1965. — Т. 85, № 2. — С. 197.
238. Альтшулер Л. В., Бушман А. В., Жерноклетов М. В. и др. // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 78. — С. 741.
239. Взрывные лабораторные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах / Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Крупников К. К., Панов Н. В. // УФН. — 1996. — Т. 166, № 5. — С. 575.
240. Jones A. H., Isbell W. H., Maiden C. J. // J. Appl. Phys. — 1966. — V. 37. — P. 3493.
241. Прохоров А., Фортвов В., Анисимов С. Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях // УФН. — 1984. — Т. 142, № 3. — С. 395.
242. Shock Compression of Condensed Matter-1995 / Ed. by S. C. Schmidt, W. C. Tao. — AIP Conf. Proc. — 1996. — P. 1255.
243. Baumung K., Bluhm J. H., Goel B. et al. // Laser and Particle Beams. — 1996. — V. 14, No. 2. — P. 181.
244. Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортвов В. Е. Уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черногловка. — ИПХФ РАН, 1992.
245. Фортвов В. Е., Якубов И. Т. Неидеальная плазма. — М.: Энергоатомиздат, 1994.
246. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Препринт ИПМ АН СССР 375. — М.: ИПМ АН СССР, 1975.
247. Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках / Под ред. М. В. Жерноклетова. — Саров: ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.

248. Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е., Марченко А. С. // ТВТ. — 1989. — Т. 27. — С. 636.
249. Gryaznov V. K., Iosilevski I. L., Fortov V. Calculation of Porous Metal Hugoniot // Physics of Strongly Coupled Plasmas / Ed. by W. D. Kraeft, M. Schlanges. — Singapore: World Scientific, 1996. — P. 351.
250. Свойства конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах / Под ред. Р. Ф. Трунина. — ВНИИЭФ, 1992.
251. Иосилевский И. Л., Грязнов В. К. // ТВТ. — 1981. — Т. 19. — С. 1121.
252. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселадновых пробегов и уравнений состояния. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000.
253. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортвов В. Е. Термодинамика ударно-сжатой плазмы в представлении химической модели // Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. — М.: Наука, 2000. — С. 342.
254. Vaus M., Hansen J. P. // Phys. Rep. — 1980. — V. 59. — P. 1.
255. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортвов В. Е. Расчет термодинамических свойств ударно-сжатой плазмы металлов // Физика низкотемпературной плазмы. — Петрозаводск, 1995. — С. 105.
256. Ichimaru S., Iyetomi H., Tanaka S. // Phys. Rep. — 1987. — V. 149. — P. 91.
257. Kahlbaum T., Förster A. Generalized thermodynamic functions for electrons in a mixture of hard spheres: Application to partially ionized nonideal plasmas // Fluid Phase Equilibria. — 1992. — V. 76. — P. 71.
258. Mansoori C. F., Carnahan V., Starling K. E., Leland T. W. J. // J. Chem. Phys. — 1971. — V. 54. — P. 1523.
259. Ashcroft N. W., Lekner J. Structure and Resistivity of Liquid Metals // Phys. Rev. — 1966. — V. 145, No. 1. — P. 83.
260. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
261. Ликальтер А. А. Газообразные металлы // УФН. — 1992. — Т. 162, № 7. — С. 119.
262. McQueen R. G., Marsh S. P. // J. Appl. Phys. — 1960. — V. 31. — P. 1253.
263. Shock-Wave Compressions of Twenty-Seven Metals. Equations of State of Metals / Walsh J. M., Rice M. H., McQueen R. G., Yarger F. L. // Phys. Rev. — 1957. — V. 108, No. 2. — P. 196.
264. Альтшулер Л. В., Баканова А. А., Трунин Р. Ф. Ударные адиабаты и нулевые изотермы семи металлов при высоких давлениях // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42. — С. 91.
265. Алексеев Ю. Л., Ратников Б. П., Рыбаков А. П. Ударные адиабаты пористых металлов // ПМТФ. — 1971. — № 2. — С. 101.
266. Young D. A. Report UCRL-52352. — Livermore: Univ. of California, 1977.
267. Баканова А. А., Дудолов И. П., Сутулов Ю. Н. Ударная сжимаемость пористых вольфрама, молибдена, меди и алюминия // ПМТФ. — 1974. — № 2. — С. 117.
268. Trunin R. F., Simakov G. V., Panov N. V. Shock compression of porous aluminum and nickel at megabar pressures // High Temp. — 2001. — V. 39. — P. 401.

## МЕТОДЫ МОНТЕ–КАРЛО И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

### 5.1. Метод Монте–Карло. Псевдопотенциалы

В области сильного межчастичного взаимодействия теоретические методы, основанные на теории возмущений, становятся неприменимыми, что делает необходимым привлечение машинных методов Монте–Карло и молекулярной динамики [1–4].

Численный метод Монте–Карло, не использующий разложения по малым параметрам, является особенно эффективным в случае плотных газов и жидкостей, а также однокомпонентной плазмы — систем, в которых вид потенциала межчастичного взаимодействия точно известен. Метод исходит из первых принципов классической статистической механики и основан на прямом машинном вычислении средних термодинамических величин [5]:

$$\langle F \rangle = Q^{-1}(N, V, T) \int \dots \int F_N(q) \exp[-\beta U_N(q)] d^N q, \quad (5.1)$$

где

$$Q^{-1}(N, V, T) \int \dots \int F_N(q) \exp[-\beta U_N(q)] d^N q,$$

— конфигурационный интеграл,  $\beta = 1/kT$ , а потенциал межчастичного взаимодействия предполагается заданным (и в большинстве конкретных расчетов парным):

$$U_N(q) = \sum_{ij} \Phi(r_{ij}, T), \quad r_{ij} = |q_i - q_j|. \quad (5.2)$$

К настоящему времени методом Монте–Карло выполнены исчерпывающие расчеты термодинамических и структурных свойств, а также фазовых границ большого количества так называемых «простых» систем, подчиняющихся классической статистике Больцмана, — ансамблей, твердых и мягких сфер, их смесей, плотных флюидов с разными межчастичными потенциалами и даже ядерной материи [4, 6, 7], а также однокомпонентной плазмы на фоне компенсирующего заряда противоположного знака, т. е. термодинамических систем с заданным и не вызывающим сомнения потенциалом взаимодействия. Подобные расчеты являются, с точностью до погрешностей машинного счета, в принципе точными и выполняют роль «машинного эксперимента» для сопоставления с ним аналитических моделей уравнений состояния.

Мы не будем здесь останавливаться на обширной литературе по этим вопросам (часть из них затронута в гл. 2), а обсудим роль и способы учета квантовых эффектов в рамках классического формализма Монте–Карло.

Применение техники Монте–Карло к многокомпонентной плазме наталкивается на специфические трудности учета квантовых эффектов, играющих в реальной плазме определенную роль и приводящих к образованию связанных состояний. Напомним, что именно введение квантовых эффектов обеспечивает образование атомов, ионов и молекул, обеспечивая устойчивость системы отрицательных электронов и положительных ядер при любых параметрах состояния вещества, а не только там, где соответствующие безразмерные буквенные критерии, содержащие постоянные Планка, не малы.

В псевдопотенциальной модели плазмы квантовые эффекты учитываются введением эффективного парного электрон-ионного потенциала  $\Phi_{ei}(r, T)$ , определяемого из условия равенства квантовомеханической вероятности нахождения частицы в данной точке пространства классической Больцмановской экспоненте [5, 8]:

$$\lambda_e^3 \sum_a |\Psi_a(r)|^2 \exp(-\beta E_a) \equiv \exp[-\beta \Phi_{ei}(r, T)], \quad (5.3)$$

где  $\Psi_a$  и  $E_a$  — ортонормированные волновые функции и собственные значения энергии,  $\lambda_e$  — тепловая длина волны электрона, а суммирование производится по всем состояниям дискретного и непрерывного спектров.

Определенный таким образом псевдопотенциал при больших  $r \gg \lambda_e$  совпадает с кулоновским, а при  $r \rightarrow 0$  имеет конечное значение и зависит от конкретной электронной структуры элемента, которая определяется самосогласованным решением квантовомеханической задачи многих тел и уже не может быть описана парным приближением (5.3). Игнорирование этого факта [5] может привести к появлению нефизических комплексов из-за слишком большой глубины псевдопотенциала (5.3).

Существенное улучшение модели парных потенциалов [5] было достигнуто следующим разбиением:

$$\begin{aligned} \exp[-\beta \Phi_{ei}(r, T)] &= S_{ei}^b + \exp[-\beta \Phi_{ei}^*(r, T)] \equiv \\ &\equiv \lambda_e^3 \sum_{E_a \lesssim -kT} |\Psi_a(r)|^2 (e^{-\beta E_a} - 1 + \beta E_a) + \lambda_e^3 \sum_{E_a \gtrsim -kT} |\Psi_a(r)|^2 \exp(-\beta E_a), \end{aligned} \quad (5.4)$$

где связанные состояния учитываются введением слагаемого  $S_{ei}^b$  определяющего статистическую сумму атома, согласно [9], а непрерывный спектр описывается псевдопотенциалом электрон-ионного взаимодействия  $\Phi_{ei}^*$ . Построенные таким образом псевдопотенциалы в некулоновской области слабо зависят от температуры, а также (поскольку  $\Phi_{ei}^*$  определяются в основном водородоподобными состояниями) от сорта химического элемента. На основе подобия по температуре и близости псевдопотенциалов различных химических элементов была предложена простая аппроксимация [5], лежащая в основе псевдопотенциальной модели плазмы нулевого приближения:

$$\begin{aligned} \beta \Phi_{ei}^0(x, T) &= \begin{cases} -\varepsilon, & r \leq \sigma, \\ -x^{-1}, & r > \sigma, \end{cases} \quad \sigma = e^2 \beta / \varepsilon, \quad x = r / \beta e^2, \\ \beta \Phi_{ee}^0(x) &= \beta \Phi_{ii}^0(x) = x^{-1}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

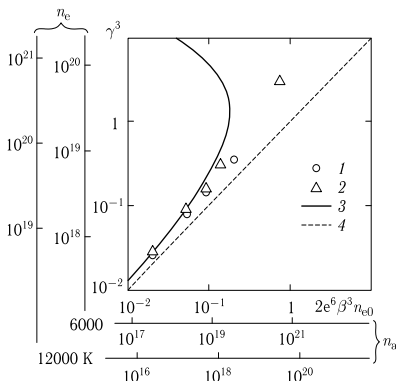


Рис. 5.1. Уравнение ионизационного равновесия в цезиевой плазме при  $T = 6000$  и  $12000\text{ K}$  [5]. 1 —  $\varepsilon = 2$ , 2 —  $\varepsilon = 4$ , 3 — закон Дебая-Хюккеля, 4 — идеальная плазма [10]

где численный параметр модели  $\varepsilon$  выбирается с привлечением экспериментальных данных (рис. 5.1).

В целом область применимости псевдопотенциальной модели низкотемпературной плазмы оказывается ограниченной вследствие неучета многочастичных взаимодействий и отсутствия информации о дискретном энергетическом спектре в выражениях (5.3)–(5.5), который в плотной плазме может быть искажен из-за сильного взаимодействия и, вообще говоря, заранее не известен. В слабоионизованной плазме наряду с кулоновским взаимодействием становится существенным также и взаимодействие с участием нейтральных частиц. Приближенный учет взаимного отталкивания осуществляется при этом моделью мягких или твердых сфер, учитывающей эффекты собственного объема атомов и приводящей при значительных сжатиях к холодной ионизации давлением.

## 5.2. Квантовый метод Монте-Карло. Интегралы по траекториям

Этот метод развит в рамках фейнмановской формулировки квантовой механики [5]. Основная идея данной формулировки заключается в представлении матрицы плотности и, следовательно, термодинамических величин в виде интегралов по траекториям; при этом низкотемпературная матрица плотности, для которой нет физических параметров малости, тождественно представляется в виде произведения большого числа высокотемпературных матриц плотности:  $e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\Delta\beta\hat{H}} \cdot e^{-\Delta\beta\hat{H}} \dots e^{-\Delta\beta\hat{H}}$ , где  $\Delta\beta = \beta/(n+1)$ . Это приводит к появлению промежуточных координат, эффективное интегрирование по которым выполняется методом Монте-Карло [5, 11, 12].

Явный вид каждого высокотемпературного сомножителя может быть найден с помощью теории возмущений с погрешностью, обратно пропорциональной, по крайней мере, квадрату числа высокотемпературных сомножителей. В этом случае погрешность всего произведения высокотемпературных матриц плотности  $\varepsilon$  будет обратно пропорциональна числу сомножителей и, следовательно,  $\varepsilon \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ . Кроме того, погрешность метода можно оценить путем сравнения результатов, полученных при варьировании числа сомножителей  $n$ .

Таким образом, в отличие от других методов моделирования вырожденных неидеальных систем при ненулевой температуре, этот метод не использует дополнительных физических предположений и аппроксимаций, что позволяет изучать различные физические явления «из первых принципов». В частности, были получены уверенные свидетельства существования плазменного фазового перехода в металлическом состоянии сильно сжатого водорода, а также выяснены условия существования квантового фазового перехода в кристаллическое состояние протонов в сжатом водороде и достаточно тяжелых дырок в полупроводниках.

Основная идея квантового метода Монте-Карло (ММК) изложена, например, в монографии [5]. Для водородной плазмы при температурах выше 1 эВ протоны можно считать классическими, однако для рассмотрения электронно-дырочной плазмы или кварк-глюонной плазмы это приближение в общем случае не справедливо. Ниже обсуждается обобщение квантового метода Монте-Карло на случай, когда все компоненты плазмы являются квантовыми.

Статистическая сумма квантовой системы при температуре  $T = 1/\beta k$  выражается через ее матрицу плотности посредством формулы

$$Z(N_e, N_p, V, \beta) = \frac{1}{N_e! N_p!} \sum_{\sigma} \int dq \rho(q, \sigma; \beta), \quad (5.6)$$

где  $q = \{q_e, q_p\}$  и  $\sigma = \{\sigma_e, \sigma_p\}$  обозначают трехмерные пространственные координаты и спиновые степени свободы  $N_e$  электронов и  $N_p$  протонов (дырок) ( $N_e = N_p$ ), т. е.  $q_a = \{q_{1,a}, \dots, q_{l,a}, \dots, q_{N_a,a}\}$  и  $\sigma_a = \{\sigma_{1,a}, \dots, \sigma_{l,a}, \dots, \sigma_{N_a,a}\}$ ,  $a = e, p$ . Матрица плотности  $\rho$  в общем случае неизвестна, однако может быть вычислена путем представления ее в виде произведения высокотемпературных сомножителей, которое в пределе бесконечного числа сомножителей переходит в интеграл по траекториям:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} \int dq^{(0)} \rho(q^{(0)}, \sigma; \beta) = \\ & = \int dq^{(0)} \dots dq^{(n)} \rho^{(1)} \cdot \rho^{(2)} \dots \rho^{(n)} \sum_{\sigma} \sum_{P_e} \sum_{P_p} (\pm 1)^{\varkappa_{P_e} + \varkappa_{P_p}} \mathcal{S}(\sigma, \hat{P}_e \hat{P}_p \sigma'_a) \times \\ & \quad \times \hat{P}_e \hat{P}_p \rho^{(n+1)} \Big|_{q^{(n+1)=q^{(0)}, \sigma'=\sigma}, \quad (5.7) \end{aligned}$$

где  $\rho^{(i)} = \rho(q^{(i-1)}, q^{(i)}; \Delta\beta) = \langle q^{(i-1)} | e^{(-\Delta\beta \hat{H})} | q^{(i)} \rangle$ .

Гамильтониан  $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$  содержит кинетическую энергию ( $\hat{K}$ ) и потенциальную энергию взаимодействия ( $\hat{U} = \hat{U}_{pp} + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{ep}$ ). Индекс  $i = 1, \dots, n+1$  в (5.7) нумерует высокотемпературные (взяты при температуре  $(n+1)T$ ) матрицы плотности  $\rho^{(i)}$ , выражения для которых могут быть получены путем решения уравнения Блоха в пределе высоких температур. Таким образом, каждая частица в плазме представляется  $(n+1)$  точкой (рис. 5.2), а вся конфигурация частиц описывается вектором

$$\mathbf{q} = \left\{ q_{1,e}^{(0)}, \dots, q_{1,e}^{(n+1)}, q_{2,e}^{(0)}, \dots, q_{2,e}^{(n+1)}, \dots, q_{N_e,e}^{(0)}, \dots, q_{N_e,e}^{(n+1)}, q_{1,p}^{(0)}, \dots, q_{N_p,p}^{(n+1)} \right\}$$

с размерностью  $3(N_e + N_p)(n+1)$ .

Спиновые эффекты учитываются спиновой частью матрицы плотности ( $S$ ), а обменные эффекты — операторами перестановки  $\hat{P}_e$  и  $\hat{P}_p$ , которые воздействуют на пространственные  $q^{(i+1)}$  и спиновые  $\sigma'$  координаты электронов и протонов. Суммы в выражении (5.7) берутся по всем перестановкам с четностями  $\varkappa_{P_e}$  и  $\varkappa_{P_p}$ . Преобразование выражения (5.7) к виду, в котором сумма по всем перестановкам заменяется детерминантом, позволяет приближенно решить «проблему знаков». В качестве примера на рис. 5.3 показана зависимость расчетного давления, при различных значениях числа частиц, от параметра вырождения  $\chi = n_e \lambda_e^3$  ( $\lambda_e$  — тепловая длина волны электрона,  $\lambda_e^2 = 2\pi\hbar^2\beta/m_e$ ), а также теоретическая зависимость. Видно, что согласие очень хорошее вплоть до значений  $\chi = 10$  и улучшается при увеличении числа частиц.

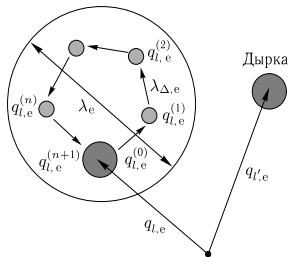


Рис. 5.2. Представление электрона и протона (дырка) в виде облака точек. Здесь  $\lambda_e^2 = 2\pi\hbar^2\beta/m_e$ ,  $\lambda_{\Delta,e}^2 = 2\pi\hbar^2\Delta\beta/m_e$ ,  $q_{1,e}^1 = q_{1,e}^0 + \lambda_{\Delta,e}\xi_{1,e}^1$  и  $\sigma = \sigma'$ . Протон имеет такое же представление в виде облака точек, однако  $\lambda_p$  и все линейные масштабы в этом случае меньше в  $\sqrt{m_p/m_e}$  раз

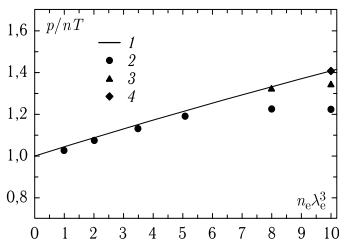


Рис. 5.3. Давление идеальной плазмы вырожденных электронов и классических протонов в зависимости от параметра вырождения. 1 — теоретическая зависимость; расчеты квантовым методом Монте-Карло [5]: 2 — 16 электронов; 3 — 32 электрона, 4 — 64 электрона

На рис. 5.3 приведены результаты расчетов квантовым ММК, в которых обменные эффекты учитывались только в основной ячейке Монте-Карло. Последующая модификация квантового метода Монте-Карло [5] состояла в более корректном учете эффектов вырождения для высоких плотностей. При достаточно больших размерах тепловой длины волны квантовой частицы по сравнению с размерами ячейки Монте-Карло дополнительно принимались во внимание обменные эффекты и в соседних  $3^3 - 1$ ,  $5^3 - 1$  и т. д. ячейках. Результаты сравнения расчетных значений давления и энергии для идеальной вырожденной плазмы показали, что согласие с теоретическими зависимостями является удовлетворительным вплоть до значений параметра вырождения  $n_e \lambda_e^3$  порядка 100. Описанный способ решения «проблемы знаков» позволил описать термодинамические свойства идеальной сильно вырожденной водородной плазмы [13, 14].

В неидеальной плазме важны эффекты взаимодействия, которые описываются множителями  $\rho^{(i)}$ . В качестве каждого из множителей  $\rho^{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, n + 1$  в формуле (5.7) можно в явном виде использовать асимптотику матрицы плотности в пределе высоких температур. Каждая такая  $N$ -частичная высокотемпературная матрица плотности может быть, в свою очередь, представлена в виде произведения двухчастичных матриц плотности. Для двухчастичной матрицы плотности при высоких температурах существует аналитическое решение уравнения Блоха в первом порядке теории возмущений [15]:

$$\rho_{a,b} \left( r_a, r'_a, r_b, r'_b, \beta \right) = \frac{m_a m_b}{(2\pi\hbar\beta)^3} \exp \left[ -\frac{m_a}{2\hbar^2\beta} \left( r_a - r'_a \right)^2 \right] \times \\ \times \exp \left[ -\frac{m_b}{2\hbar^2\beta} \left( r_b - r'_b \right)^2 \right] \exp \left[ -\beta\Phi^{ab} \right],$$

где  $\Phi^{ab}(r_a, r'_a, r_b, r'_b, \beta)$  можно аппроксимировать полусуммой диагональных псевдопотенциалов:

$$\Phi^{ab}(|r_{ab}|, \Delta\beta) = \frac{e_a e_b}{\lambda_{ab} x_{ab}} \left\{ 1 - \exp(-x_{ab}^2) + \sqrt{\pi} x_{ab} [1 - \operatorname{erf}(x_{ab})] \right\}. \quad (5.8)$$

Здесь  $x_{ab} = |r_{ab}|/\lambda_{ab}$ ,  $\operatorname{erf}(x) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^x \exp(-t^2) dt$  — функция ошибок,  $\lambda_{ab}^2 = \hbar^2\beta/2\mu_{ab}$ ,  $e_a, e_b$  — заряды частиц,  $m_a$  и  $m_b$  — массы частиц,  $\mu_{ab}^{-1} = m_a^{-1} + m_b^{-1}$  — приведенная масса. Точность получаемых результатов определяется числом множителей  $n + 1$  в подынтегральном выражении формулы (5.7), температурой  $T$  и параметром вырождения  $\chi = \max(n_e \lambda_e^3, n_i \lambda_i^3)$ :  $\varepsilon \sim (\beta R\gamma)^2 \chi / (n + 1)$ . В работе [16] показано, что псевдопотенциал (5.8) хорошо согласуется с точным квантовым потенциалом при температурах  $T > 2 \cdot 10^5$  К. Это, в частности, означает, что для моделирования кулоновской системы при температуре  $10^4$  К достаточно выбрать  $n = 20$ ; относительная погрешность расчетов при этом в самом худшем случае не превосходит 5%.

Все термодинамические функции выражаются через производные от статсуммы  $Z$ . В частности, для давления и полной энергии системы справедливы

формулы:

$$E = -\beta \partial \ln Z / \partial \beta,$$

$$\beta P = \partial \ln Q / \partial V = [\eta / 3V \partial \ln Q / \partial \eta]_{\eta=1}.$$

Многочисленные интегралы в этих выражениях вычисляются стандартным методом Метрополиса в кубической вычислительной ячейке Монте-Карло с использованием периодических граничных условий [5].

### 5.3. Плазма Н и Н + Не

Основные расчеты методом Монте-Карло для водородной плазмы к настоящему времени выполнены в широкой области значений параметра вырождения,  $\chi = n_e \lambda_e^3$ , и параметра неидеальности,  $\Gamma = \beta e^2 / d$ , где  $d = (3/4\pi n_e)^{1/3}$  — среднее расстояние между электронами с плотностью  $n_e$ .

Основной интерес представляет заштрихованная область  $n_e$ - $T$  диаграммы водородной плазмы (рис. 5.4), где важны корреляционные и квантовые эффекты, являющиеся причиной возможного проявления интересных физических эффектов, например, таких как возникновение и распад связанных состояний, переход Мотта и металлизация плазмы, кристаллизация протонов и так далее. Точка  $a$  на рис. 5.4 соответствует слабо неидеальной сильно вырожденной плазме, когда плотность и температура высоки. В условиях точки  $b$  плазма вырождена и неидеальна. Точка  $c$  соответствует слабой неидеальности и слабому вырождению. В точке  $d$  сильная неидеальность и слабое вырождение.

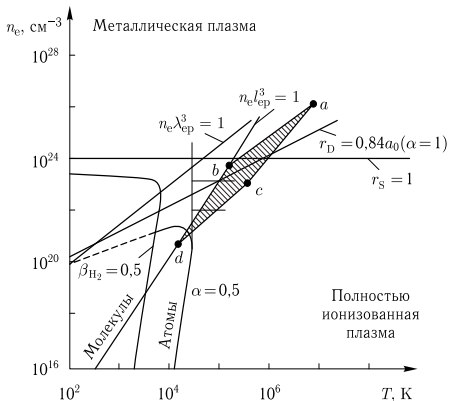


Рис. 5.4. Качественная  $n_e$ - $T$  диаграмма водородной плазмы. Параметры  $r_D$ ,  $a_B$ ,  $r_S$ ,  $l_{ep}$ ,  $\lambda_{ep}$  обозначают радиус Дебая, радиус Бора, параметр Бракнера, длину Ландау и тепловую длину волны электрона;  $\alpha$  и  $\beta$  — коэффициент ионизации и диссоциации, соответственно

Для анализа возможности появления новых физических явлений в плазме, например, таких, как частичная диссоциация и ионизация, переход Мотта, упорядочивание протонов при высоких плотностях и так далее, рассмотрим поведение парных корреляционных функций (рис. 5.5 и 5.6). На рис. 5.5 а при  $T = 20\,000\text{ К}$  и  $n = 10^{22}\text{ см}^{-3}$  протон-протонная ( $g_{ii}$ ) и электрон-электронная ( $g_{ee}$ ) корреляционные функции имеют резкие максимумы при одном и том же значении координаты  $1,4 a_B$ , что свидетельствует о существовании в этих условиях молекул водорода. По этой причине максимум электрон-протонной ( $g_{ie}$ ) корреляционной функции (помноженной на  $r^2$ ) смещен в сторону более высоких по сравнению с радиусом Бора  $a_B$  значений координаты. При понижении плотности молекулы исчезают, и максимум  $g_{ie}$  возникает при  $r = a_B$ . Рисунок 5.5 б показывает, что с возрастанием температуры до  $T = 50\,000\text{ К}$  максимумы  $g_{ii}$  и  $g_{ee}$  размываются, что свидетельствует об исчезновении молекул (диссоциации).

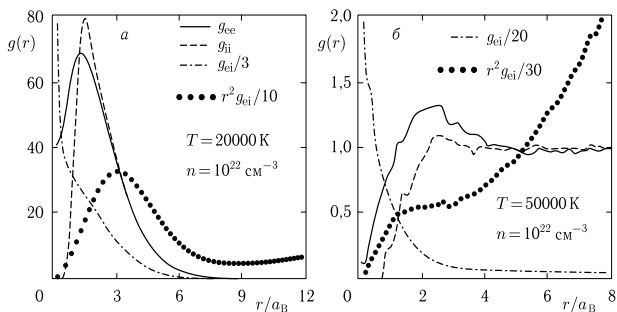


Рис. 5.5. Корреляционные функции плотной водородной плазмы: электрон-электронная  $g_{ee}$ , протон-протонная  $g_{ii}$ , электрон-протонная  $g_{ie}$ . Значения параметров неидеальности, вырождения и Бракнера: а)  $\Gamma = 2,9$ ,  $\chi = 1,46$ ,  $r_s = 5,44$ ; б)  $\Gamma = 1,16$ ,  $\chi = 0,37$ ,  $r_s = 5,44$

При повышении плотности при той же температуре  $T = 50\,000\text{ К}$  наблюдаются новые физические явления. На рис. 5.5 б, 5.6 а и 5.6 б хорошо прослеживается характер изменения протон-протонной корреляционной функции. Кривая, типичная для частично ионизованной плазмы (см. рис. 5.5 б), при возрастании концентрации преобразуется в характерную для жидкости (рис. 5.5 а) и твердого тела (рис. 5.6 б).

Чрезвычайно интересно проследить также и поведение электрон-электронной корреляционной функции при возрастании плотности:  $g_{ee}$  на рис. 5.5 б типична для частично ионизованной плазмы, тогда как на рис. 5.6 а наблюдается резкое возрастание в области малых значений координат. Дальнейшее увеличение концентрации приводит к более однородному распределению электронов в пространстве (рис. 5.6 б). Для анализа этого явления на рис. 5.6 а построены также функции  $r^2 g_{ee}$  и  $r^2 g_{ii}$ . Плато на кривой  $r^2 g_{ii}$  примерно на два

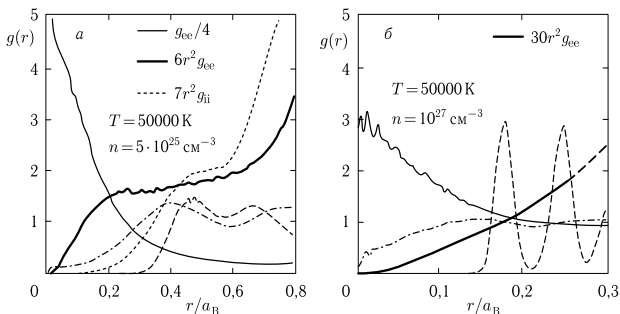


Рис. 5.6. Корреляционные функции плотной водородной плазмы [14, 24]. Обозначения те же, что и на рис. 5.5. Значения параметров неидеальности, вырождения и Бракнера: а)  $\Gamma = 19,8$ ,  $\chi = 1848$ ,  $r_s = 0,318$ ; б)  $\Gamma = 53,8$ ,  $\chi = 37\,000$ ,  $r_s = 0,117$

раза уже, чем на  $r^2 g_{ee}$ , это означает, что наиболее вероятное расстояние между электронами в два раза меньше, чем между протонами. Изучение электронных траекторий для этого случая показывает, что происходит спаривание электронов с противоположными спинами. «Размер» электронов примерно равен расстоянию между протонами, что приводит к частичному перекрытию спаренных электронов.

Рассмотрим теперь в качестве примера уравнение состояния водорода при достаточно высокой температуре [13]. На рис. 5.7 представлена зависимость давления водородной плазмы от плотности при  $T = 50\,000$  К. Хорошо видно, что кривая давления ведет себя монотонно, а результаты расчетов хорошо согласуются с вычислениями квантовым методом Монте-Карло с ограничениями [16] в области умеренных плотностей.

Иная ситуация наблюдается при понижении температуры. На рис. 5.8 представлена зависимость давления водородной плазмы от плотности при  $T = 10\,000$  К. Обнаруженная область плохой сходимости к равновесному состоянию при плотностях  $0,1\text{--}1,5\text{ г/см}^3$  свидетельствует о суще-

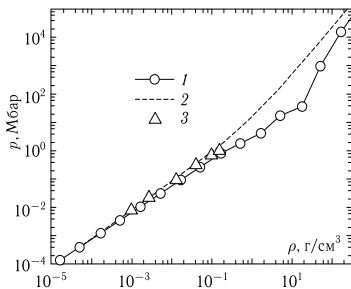


Рис. 5.7. Давление водородной плазмы в зависимости от плотности при  $T = 50\,000$  К. 1 — моделирование квантовым методом Монте-Карло [13]; 2 — теоретическая зависимость для идеальной плазмы; 3 — моделирование квантовым методом Монте-Карло с ограничениями [16]

ствовании фазового перехода. Так как на изотерме  $T = 50\,000$  К подобные аномалии отсутствуют, фазовый переход должен иметь критическую точку примерно при  $T \approx 30\,000$  К. Можно привести еще ряд аргументов в пользу существования фазового перехода: расчет методом функционала плотности в области стабильности кристаллического водорода при понижении плотности приводит к аномалиям в ион-ионной корреляционной функции при  $\rho = 0,8$  г/см<sup>3</sup> [17] (примерно верхняя граница перехода по плотности); максимальная плотность, при которой удалось провести вычисления квантовым методом Монте-Карло с ограничениями [16], равна  $\rho = 0,15$  г/см<sup>3</sup> (примерно нижняя граница перехода по плотности). В то же время расчет квантовым методом Монте-Карло для смеси 33% гелия и 67% водорода при той же температуре не обнаружил особенностей в поведении уравнения состояния (кривая 3 на рис. 5.8).

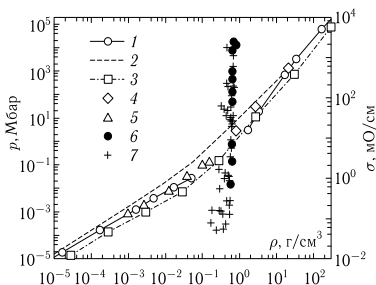


Рис. 5.8. Давление и электропроводность водородной плазмы в зависимости от плотности при  $T = 10\,000$  К. 1 — моделирование квантовым методом Монте-Карло [13]; 2 — аналитическая зависимость для идеальной плазмы; 3 — моделирование квантовым методом Монте-Карло смеси 33% He и 67% водорода [13]; 4 — расчет методом функционала плотности [17]; 5 — расчет квантовым методом Монте-Карло с ограничениями [16]; 6, 7 — экспериментальная электропроводность водородной плазмы, правая ось, 6 — [18], 7 — [19]

Резкий рост электропроводности водорода (на 4–5 порядков) зафиксирован в ударно-волновых экспериментах в очень узком диапазоне плотностей, 0,3–0,5 г/см<sup>3</sup>, при температурах 5000–15 000 К (значки 6, 7 на рис. 5.8). Наконец, в расчетах квантовым методом Монте-Карло наблюдалось расщепление системы частиц на капли в ячейке Монте-Карло.

Большой интерес представляют также исследования с помощью квантового метода Монте-Карло термодинамических свойств смеси водорода с гелием [14]. Результаты сравнивались с химической моделью плазмы [20, 21]. В этой модели используется статистика Больцмана для молекул и ионов и статистика Ферми-Дирака для электронов. Кроме того, модель [20, 21] учитывает большое число физических эффектов, включая диссоциацию и ионизацию, взаимодействие между заряженными частицами, атомами и молекулами, экранировку ионов при высоких плотностях, возбуждение элек-

тронных уровней молекул, а также некоторые другие явления «второго порядка». Из-за сложности этой модели уравнения состояния водорода и гелия представлены в табличной форме [21]. Поэтому термодинамические свойства водорода и гелия рассчитывались с помощью относительно простой программы интерполяции. Свойства водородно-гелиевой плазмы можно получить с помощью метода «линейного смешивания». Например, энергию  $E(p, T)$  смеси водорода с гелием с массовой концентрацией гелия  $Y = m_{\text{He}}/(m_{\text{He}} + m_{\text{H}})$  при давлении  $p$  и температуре  $T$  можно найти по формуле:  $E(p, T) = (1 - Y)E_{\text{H}}(p, T) + YE_{\text{He}}(p, T)$ , где  $E_{\text{H}}(p, T)$  — внутренняя энергия водорода,  $E_{\text{He}}(p, T)$  — гелия. Очевидно, что модель линейного смешивания хорошо работает только для слабозаимодействующих смесей, когда компоненты не оказывают значительного влияния друг на друга.

На рис. 5.9 изображены зависимости давления и внутренней энергии водородной плазмы от температуры на изохорах  $n_e = 10^{20}, 10^{21}$  и  $10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Видно, что результаты расчетов квантовым методом Монте-Карло очень хорошо согласуются с результатами [21] во всем диапазоне температур. Внутренние энергии, вычисленные по двум моделям, практически совпадают до температур около  $3 \cdot 10^4 \text{ К}$ , однако для температуры  $10^4 \text{ К}$  значения энергии, полученные по квантовому методу Монте-Карло, для изохор  $10^{20}, 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , существенно выше, чем кривые, полученные по [21]. На рис. 5.9б также показана относительная концентрация атомов водорода в зависимости от температуры. Видно, что в диапазоне  $10^4 - 3 \cdot 10^4 \text{ К}$  плазма состоит преимущественно из атомов. Это обстоятельство приводит к понижению внутренней энергии. Более высокие значения энергии, получаемые в квантовом методе Монте-Карло, можно объяснить наличием в системе в этих условиях двух характерных сильно отличающихся масштабов: внутриатомного и межатомного. Для накопления статистики в таких системах при моделировании необходимо генерировать очень большое количество конфигураций, что требует длительного времени расчета. Уменьшение концентрации атомов на изохоре  $10^{22} \text{ см}^{-3}$  при  $T = 10^4 \text{ К}$  с одновременным сокращением межмолекулярного

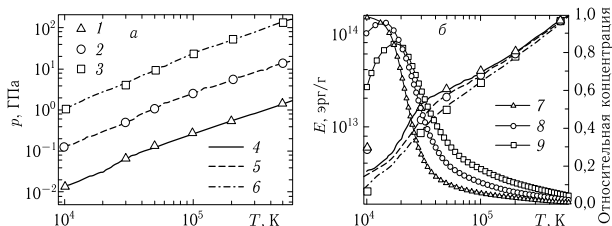


Рис. 5.9. Зависимость давления (а) и внутренней энергии (б) водородной плазмы от температуры. Расчет квантовым методом Монте-Карло [14]: 1 — изохора  $10^{20}$ , 2 —  $10^{21}$ , 3 —  $10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Вычисления по химической модели [21]: 4 — изохора  $10^{20}$ , 5 —  $10^{21}$ , 6 —  $10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Кривые 7, 8, 9 на рис. 5.9б — доля атомов водорода по отношению к общему числу частиц в плазме (правая ось) в зависимости от температуры на изохорах  $10^{20}, 10^{21}$  и  $10^{22} \text{ см}^{-3}$ , соответственно [21]

расстояния приводит к согласию внутренней энергии, вычисленной квантовым методом Монте-Карло в этих условиях, с расчетами по химической модели плазмы [21] (см. рис. 5.9 б).

Были рассчитаны также изотермы водородно-гелиевой плазмы с двумя различными массовыми концентрациями гелия. Принятая в расчетах относительно низкая концентрация гелия в смеси ( $Y = 0,234$ ) соответствовала его содержанию в верхних слоях атмосферы Юпитера. Были рассчитаны изотермы от  $10^4$  до  $2 \cdot 10^5$  К в диапазоне концентрации электронов от  $10^{20}$  до  $3 \cdot 10^{24}$  см $^{-3}$ . Интерес к термодинамическим свойствам смеси с таким содержанием гелия вызван экспериментальной работой [22], в которой измерялась проводимость водородно-гелиевой плазмы при квазиизоэнтропическом сжатии в условиях ионизации давлением.

На рис. 5.10 приведены изотермы  $4 \cdot 10^4$ ,  $5 \cdot 10^4$ ,  $10^5$  и  $2 \cdot 10^5$  К. Из рисунка видно, что снова наблюдается хорошее согласие с моделью [21] для давления и удовлетворительное — для внутренней энергии. Для сравнения на рис. 5.10 также изображена изотерма  $T = 10^5$  К идеальной плазмы вырожденных электронов и классических протонов и  $\alpha$ -частиц. Эта изотерма приближается к рассчитанной по химической модели при низких и высоких плотностях, а в области образования связанных состояний давление и энергия идеальной плазмы больше, чем неидеальной. В обеих моделях на зависимостях энергии неидеальной плазмы от концентрации электронов на изотермах имеются минимумы, связанные с образованием атомов.

Были проведены расчеты и для водородно-гелиевой плазмы с высоким массовым содержанием гелия  $Y = 0,988$ . Следует отметить, что из-за большого значения потенциала первой ионизации гелия вычисления при низких температурах требуют большого числа высокотемпературных разбиений в представлении статсуммы в виде интеграла по траекториям, поэтому температуры моделирования для  $Y = 0,988$  выбирались не ниже  $10^5$  К. На рис. 5.11 а показаны зависимости давления, отнесенного к давлению идеальной плазмы, на четырех изотермах в зависимости от концентрации электронов, а на рис. 5.11 б — удельной внутренней энергии на частицу. Видно, что ионизаци-

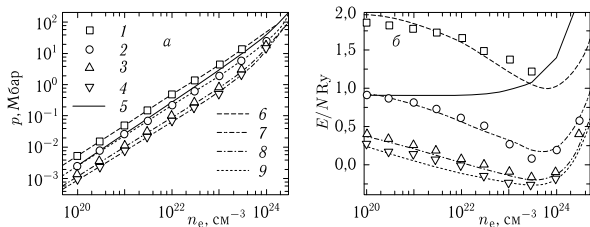


Рис. 5.10. Давление (а) и внутренняя энергия на частицу в Ry (б) водородно-гелиевой плазмы в зависимости от концентрации электронов с массовой концентрацией гелия  $Y = 0,234$ . ММК [14]: 1 —  $2 \cdot 10^5$ , 2 —  $10^5$ , 3 —  $5 \cdot 10^4$ , 4 —  $4 \cdot 10^4$  К. Идеальная плазма: 5 —  $10^5$  К. Модель [21]: 6 —  $2 \cdot 10^5$ , 7 —  $10^5$ , 8 —  $5 \cdot 10^4$ , 9 —  $4 \cdot 10^4$  К

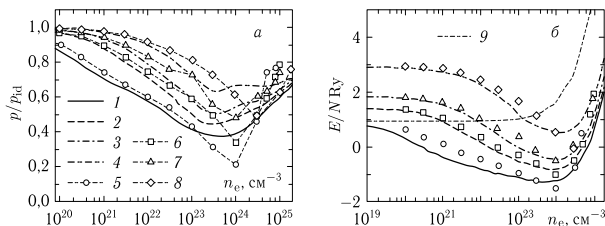


Рис. 5.11. Давление, отнесенное к давлению идеальной плазмы (а) и внутренняя энергия на частицу в Ry (б) водородно-гелиевой плазмы в зависимости от концентрации электронов с массовой концентрацией гелия  $Y = 0,988$  [14]. Модель [21]: 1 — 100, 2 — 156, 3 — 200, 4 — 312 кК. ММК : 5 — 100, 6 — 156, 7 — 200, 8 — 312 кК. Энергия на частицу в идеальной плазме: 9 —  $10^5$  кК

онные минимумы хорошо воспроизводятся, а расчетные точки удовлетворяют асимптотикам для классической идеальной плазмы (при низких концентрациях). Следует также отметить хорошее согласие с моделью [21].

Для температур ниже  $4 \cdot 10^4$  К согласие между результатами расчетов [14, 23] и по модели [21] при  $Y = 0,234$  ухудшалось (рис. 5.12). Это вызвано как плохой применимостью химической модели для неидеальной вырожденной плазмы, так и погрешностями модели линейного смешивания. На изотермах  $2 \cdot 10^4$ ,  $1,5 \cdot 10^4$  и  $10^4$  К, как и ранее для водородной плазмы [24], были обнаружены области плохой сходимости к равновесному состоянию. Одна из этих областей в диапазоне плотностей от  $0,5$  до  $5 \text{ г/см}^3$  совпадает с положением плазменного фазового перехода в водороде и водородно-гелиевой плазме при низких концентрациях гелия, предсказанного ранее [20, 21, 25]. Кроме того, в диапазоне  $0,0,83 \text{ г/см}^3$  наблюдается резкий рост проводимости при температурах  $\approx 5 \cdot 10^3$  К [22]. Однако на изотермах  $10^4$  К и  $1,5 \cdot 10^4$  К обнаружена еще одна область  $0,010,19 \text{ г/см}^3$ , в которой при моделировании давление становилось отрицательным. Для смеси водорода с гелием могут одновременно существовать два плазменных фазовых перехода при массо-

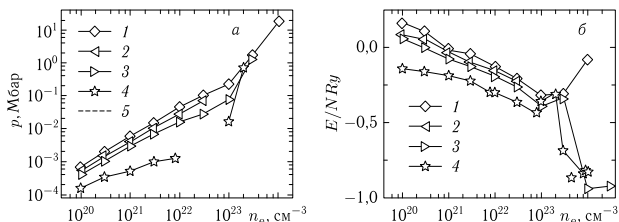


Рис. 5.12. Давление (а) и внутренняя энергия на частицу в Ry (б) водородно-гелиевой плазмы с массовой концентрацией гелия  $Y = 0,234$  в зависимости от концентрации электронов. Работа [14]: 1 — 30, 2 — 25, 3 — 20, 4 — 10 кК. Модель [21]: 5 — 30 кК

вых концентрациях гелия  $Y > 0,93$  [25], но в расчетах квантовым методом Монте–Карло содержание гелия было достаточно низким  $Y = 0,234$ . Для объяснения этого явления требуются дополнительные исследования.

Свойства плазменного фазового перехода в водородно-гелиевой плазме существенно определяются концентрацией гелия [20, 21, 25]. Часто такой переход ассоциируют с резким ростом электропроводности плазмы (ионизация давлением). Оценить диапазон температур и плотностей, в котором происходит резкий рост электропроводности, можно из ударно-волновых экспериментов. При квазиизоэнтropicком сжатии водорода переход из низкопроводящего в высокопроводящее состояние происходит при  $T \approx 3\text{--}15$  кК и  $\rho \approx 0,4\text{--}0,7$  г/см<sup>3</sup> [26, 27], в то время как для гелия переход осуществляется при  $T \approx 140$  кК и  $\rho \approx 0,7\text{--}1,25$  г/см<sup>3</sup> [28]. В соответствии с теоретическими моделями, критическая точка плазменного фазового перехода составляет  $T_c(\text{H}) \approx 12\text{--}19$  кК,  $p_c(\text{H}) \approx 0,2\text{--}0,9$  Мбар [20, 25, 29]. В чистом гелии критические параметры плазменного фазового перехода, по разным данным, суть  $T_c(\text{He}) \approx 17$  кК [25] или  $T_c(\text{He}) \approx 35$  кК [30] и  $p_c(\text{He}) \approx 7$  Мбар [25, 30]. Для смеси водорода с гелием с массовой фракцией гелия 0,93 критическая температура перехода была оценена  $T_c(\text{He}) \approx 35$  кК, однако зависимость критических параметров от состава плазмы не исследовалась. В соответствии с квантово-статистической моделью [25], при массовой концентрации гелия  $Y < 0,93$  и температуре ниже, чем критические температуры переходов в чистом водороде и гелии свойства водородно-гелиевой плазмы определяются, в основном, водородом, и существует лишь один плазменный фазовый переход. При высоких массовых концентрациях гелия,  $Y > 0,93$ , существуют два перехода. В расчетах методом Монте–Карло наблюдалась одна область термодинамической неустойчивости при  $T = 2 \cdot 10^4$  К и две области неустойчивости при  $T = 10^4$  К при низкой концентрации гелия,  $Y = 0,234$ . Результаты моделирования показаны на рис. 5.13 вместе с экспериментальными данными и теоретическими предсказаниями.

На изотерме  $T = 2 \cdot 10^4$  К была обнаружена область плохой сходимости к равновесному состоянию в диапазоне плотностей от 0,5 до 5 г/см<sup>3</sup>. На изотермах  $T = 1,5 \cdot 10^4$  К и  $10^4$  К эта область расширяется, начинаясь при 0,38 г/см<sup>3</sup>. Интересно, что был обнаружен еще один диапазон плотностей, в котором давление при моделировании становилось отрицательным: от 0,015 г/см<sup>3</sup> до 0,19 г/см<sup>3</sup>. Физическая причина этого явления связана с образованием многочастичных кластеров и требует дополнительного изучения. На рис. 5.13 хорошо видно, что другие предсказания плазменного фазового перехода в водородной и водородно-гелиевой плазме с низким содержанием гелия [21, 25] попадают в область, где наблюдается плохая сходимость квантового метода Монте–Карло. Быстрый рост проводимости водородно-гелиевой плазмы вдоль квазиизоэнтропы с начальным состоянием  $T = 77,4$  К и  $p = 8,1 \cdot 10^{-3}$  ГПа также наблюдается экспериментально в области плотностей 0,5–0,83 г/см<sup>3</sup> [22]. К сожалению, квантовый метод Монте–Карло, пока не может дать достоверных результатов о точном расположении и свойствах плазменного фазового перехода как в водородной, так и в водородно-гелиевой плазме.

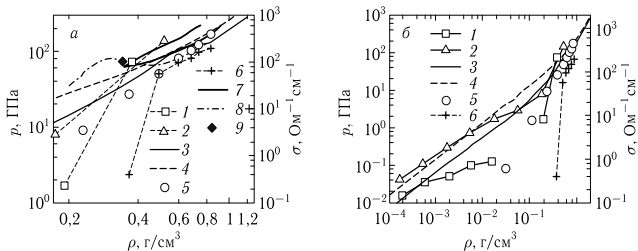


Рис. 5.13. Теоретические и экспериментальные результаты в области предполагаемого плазменного фазового перехода для  $Y = 0,234$ . Работа [14]: 1 — 10 кК, 2 — 20 кК. Модель [21]: 3 — 10 кК, 4 — 20 кК. Эксперимент [22]: 5 — квазиизоэнтропа смеси водорода с гелием,  $T \approx 5000$  К, 6 — электропроводность смеси водорода с гелием на квазиизоэнтропе (правая ось). (б) 7 — границы плазменного фазового перехода в водородной плазме [20, 21], 8 — докритическая метастабильная изотерма  $T = 12\,000$  К для  $Y = 0,308$  [25], 9 — критическая точка плазменного фазового перехода в водородно-гелиевой плазме для  $Y = 0,308$  [25]

Плазменный фазовый переход возникает в различных химических моделях плазмы примерно при одних и тех же значениях плотностей. Однако подобные подходы осложняются в области ионизации и диссоциации давлением, где чрезвычайно важен корректный учет всех видов взаимодействий. Кроме того, пренебрегается возможным образованием кластеров.

Подход [14, 31] лишен этих недостатков. Результаты расчетов в области плазменного фазового перехода показывают, что возможны альтернативные подходы для объяснения чрезвычайно резкого роста проводимости в этой области. Ранее теоретические модели предсказывали, что область возрастания проводимости возникает либо при более низких плотностях (прыжковая модель проводимости в молекулярных жидкостях), либо при более высоких (проводимость газа свободных электронов). Однако рост электропроводности возникает именно в области плазменного фазового перехода, что позволяет принять во внимание еще один механизм проводимости — прыжковую электронную проводимость между каплями металлической жидкости. Очевидно, что такой эффект будет иметь место только в промежутке между областями, где доминируют два других механизма

#### 5.4. Ударная адиабата дейтерия

Квантовый метод Монте-Карло был использован для вычисления ударной адиабаты дейтерия на основе расчетов его термодинамических свойств [31]. Давление  $p$ , удельный объем  $v$  и удельная внутренняя энергия вещества  $E$  за фронтом ударной волны связаны с начальным состоянием ( $p_0, v_0, E_0$ ) уравнением Рэнкина-Гюгонно [32]:

$$E - E_0 + \frac{1}{2}(v - v_0)(p + p_0) = 0. \quad (5.9)$$

Следуя [33], в качестве начальных были выбраны параметры, соответствующие состоянию жидкого дейтерия в нормальных условиях:  $p_0 = 0$ ,  $1/v_0 = \rho_0 = 0,171 \text{ г/см}^3$ ,  $E_0 = -15,886 \text{ эВ}$  на атом. Далее вычислялись значения давления  $p_i$  и внутренней энергии  $E_i$  при заданной температуре  $T$  (от  $10^4$  до  $10^6 \text{ К}$ ) и трех различных значениях удельного объема  $v_i$ , соответствующих  $r_s = 1,7, 1,86$  и  $2$ , где  $r_s = \langle r \rangle / a_B$ ,  $\langle r \rangle = (3/4\pi n_e)^{1/3}$ ,  $a_B$  — боровский радиус. Результаты моделирования представлены в табл. 5.1. В табл. 5.1 показаны лишь значения давления и внутренней энергии для тех удельных объемов, между которыми при данной температуре проходит ударная адиабата. В последних двух колонках приведены значения плотности  $\rho_n$  и давления  $p_n$  дейтерия на ударной адиабате.

Таблица 5.1. Термодинамические свойства и ударная адиабата дейтерия

$T, \text{ К}$	$r_s = 1,7$		$r_s = 1,86$		$r_s = 2$		$\rho_n,$ г/см <sup>3</sup>	$p_n,$ Мбар
	$p, \text{ Мбар}$	$E, \text{ эВ}$	$p, \text{ Мбар}$	$E, \text{ эВ}$	$p, \text{ Мбар}$	$E, \text{ эВ}$		
15625	2,27	-19,00	1,01	-9,69	—	—	0,854	1,113
31250	1,86	-9,95	—	—	1,34	-6,02	0,837	1,605
62500	—	—	3,14	-1,23	2,61	-0,18	0,810	3,067
$1,25 \cdot 10^5$	—	—	7,96	17,27	6,22	17,07	0,740	7,008
$2,5 \cdot 10^5$	—	—	15,97	48,22	12,38	46,85	0,720	13,305
$5 \cdot 10^5$	—	—	32,62	112,73	26,45	114,57	0,708	27,973
$10^6$	—	—	67,66	245,99	54,40	246,45	0,698	56,722

На рисунке 5.14 показаны данные экспериментальных, теоретических и расчетных работ различных авторов, посвященных ударной сжимаемости дейтерия. Измерения, выполненные на установке NOVA посредством генерации ударной волны лазерным излучением [34, 35], свидетельствуют о том, что плотность дейтерия за фронтом ударной волны может возрасти более, чем в 6 раз. Однако при высоких давлениях предельная степень сжатия  $\rho/\rho_0$  не должна превышать 4 для идеального одноатомного газа, а так как диссоциация дейтерия в ударной волне происходит при давлениях  $p \approx 0,5 \text{ Мбар}$  [45], автор работы [45] сделал вывод о недостоверности данных [34, 35]. Эксперименты, выполненные с помощью разгона алюминиевой фольги магнитным полем до скоростей более  $20 \text{ км/с}$  [36], показывают значительно меньшую степень сжатия, чем в работах [34, 35]. Данные [34, 35] и [36] не согласуются в пределах экспериментальной погрешности. В отличие от работ [34, 35] и [36], в которых использовались образцы толщиной несколько сотен микрон, измерения ударной сжимаемости твердого дейтерия на полусферическом взрывном устройстве [37] проводились в слое вещества толщиной около  $4 \text{ мм}$ . Полученная экспериментальная точка при давлении порядка  $1 \text{ Мбар}$  занимает промежуточное положение между данными [34, 35] и [36].

С 1997 года появилось множество работ, в которых делались попытки рассчитать ударную адиабату жидкого дейтерия с помощью различных теоретических подходов. Широко известное уравнение состояния [39] не учитывает эффекты диссоциации, поэтому степень сжатия дейтерия за ударной волной

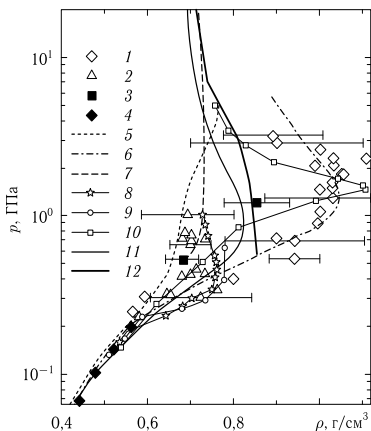


Рис. 5.14. Ударная адиабата дейтерия. Экспериментальные данные: 1 — [34, 35]; 2 — [36]; 3 — [37]; 4 — [38]. Расчет: 5 — [39]; 6 — [40]; 7 — [33]; 8 — [41]; 9 — [42]; 10 — [43]; 11 — [44]; 12 — [31]

оказывается меньше, чем при расчете другими методами. Полуэмпирическое уравнение состояния [40], учитывая диссоциацию по простой модели линейного смешивания, скорее всего переоценивает эффект диссоциации, что приводит к согласию с экспериментальными данными [34, 35]. Использование так называемых «ab initio» методов не проясняет ситуацию, так как практически каждый из них имеет свои недостатки. В большинстве работ, в которых моделировалась ударная адиабата дейтерия, результаты «первопринципных» расчетов, в частности, вычисления квантовым методом Монте-Карло с ограничениями [33] и методом квантовой молекулярной динамики [41, 42], согласуются с экспериментальными данными [36]. Ударные адиабаты дейтерия из работ [41, 42] также хорошо описывают измерения, выполненные на легкогогазовой пушке при относительно низких давлениях [38]. Расчет из работы [43], выполненный методом молекулярной динамики, в котором электроны учитывались как антисимметризованные локализованные волновые пакеты, также находится в соответствии с данными [38], однако, в отличие от [41, 42], гораздо лучше согласуется с экспериментами [34, 35].

Ударная адиабата дейтерия, вычисленная квантовым методом Монте-Карло, очень хорошо согласуется с расчетами [33] при высоких давлениях и выходит на правильную асимптотику по степени сжатия в пределе высоких давлений, однако при понижении давления отклоняется от кривой из работы [33] в сторону больших плотностей. Это происходит из-за того, что в работе [33] применен специфический способ вычисления суммы по всем перестановкам в выражении (5.9). Он состоит в учете лишь положительных

слагаемых в этой сумме с одновременным уменьшением области интегрирования. Такая процедура, не имеющая строгого теоретического обоснования, привносит в систему дополнительное отталкивание, что, очевидно, делает систему менее сжимаемой. В работе [46] показано также, что использование подхода [33] для расчета матрицы плотности не позволяет корректно воспроизвести аналитические зависимости для давления и энергии идеального ферми-газа.

Таким образом, благодаря корректному учету вклада связанных состояний и эффектов вырождения, ударная адиабата, рассчитанная квантовым методом Монте–Карло, отклоняясь в сторону более высоких плотностей от кривой из работы [33], проходит правее данных [36] и весьма близко от экспериментальной точки [37]. При давлениях ниже 1–2 Мбар начинает сказываться влияние фазового перехода, обнаруженного ранее [13], поэтому участок адиабаты ниже 1 Мбар не является достаточно надежным. Следует отметить, что ближе всего к ударной адиабате водорода, рассчитанная квантовым методом Монте–Карло, проходит кривая, полученная классическим методом Монте–Карло для реагирующих смесей [44]. В этом методе, по-видимому, наиболее точно учтены эффекты диссоциации молекул дейтерия, что позволило, даже без учета ионизации, получить хорошее согласие с опытными данными при низких температурах и давлениях [38], а также в пределах погрешности с экспериментальной точкой из работы [37].

### 5.5. Электронно-дырочная плазма полупроводников

Электронно-дырочная плазма является весьма удобным экспериментальным объектом для проверки теоретических и численных моделей неидеальных плазменных сред, поскольку относительно легко может быть создана в кристаллах редкоземельных галогенидов умеренным внешним давлением или с помощью лазерного возбуждения полупроводников. Кроме того, в литературе обсуждается возможность создания на основе электронно-дырочных плазменных сред высокотемпературных сверхпроводников и всевозможных устройств электронной техники.

Моделирование различных явлений в полупроводниках из первых принципов представляется в настоящее время невозможным из-за чрезвычайно сложного энергетического спектра (зонной структуры). Традиционно для упрощения этой задачи используют представление об электронно-дырочной плазме. В полупроводниках электроны можно относительно легко возбудить посредством внешних источников энергии, так что электроны можно считать почти свободными; при этом в валентной зоне образуется незанятая вакансия, или дырка. Имеется достаточно оснований считать систему электронов и дырок плазменной средой, частицы которой взаимодействуют по закону Кулона. Основное отличие от традиционной плазмы состоит в том, что эффективные массы этих частиц определяются энергетическим спектром полупроводника и могут изменяться в достаточно большом диапазоне. Это означает, что и электроны, и дырки необходимо трактовать как квантовые частицы (имеющие конечный размер) с учетом их взаимодействия и спинов.

В настоящее время разработано достаточно много методов расчета свойств квантовых взаимодействующих частиц, однако большинство из них обладают

рядом существенных недостатков. Так, метод Хартри–Фока–Слэтера не учитывает коллективные эффекты в плазме, а метод функционала плотности и основанный на нем метод квантовой молекулярной динамики используют для своей работы аппроксимационные выражения для обменно-корреляционного функционала. Кроме того, ни один из этих методов не подходит без существенных модификаций для моделирования двухкомпонентных квантовых систем. Для расчетов различных свойств электронно-дырочной плазмы в работе [47] использовался квантовый метод Монте–Карло. Этот метод применим при произвольно сильном межчастичном взаимодействии в вырожденных (квантовых) системах, учитывает спиновые эффекты и может быть обобщен на случай смеси многих квантовых частиц. На сегодняшний день квантовый метод Монте–Карло является единственным подходом, позволяющим рассчитывать термодинамические свойства квантовых систем при ненулевых температурах без привлечения каких-либо упрощающих предположений. Таким образом, уникальность этого метода состоит в том, что он позволяет предсказывать новые физические явления в реальных, а не модельных физических средах.

В работе [47] равновесные системы электронов и дырок моделировались в широком диапазоне температур, концентраций электронов и отношений эффективных масс дырки и электрона. В расчетах наблюдались образование и распад экситонов при изменении температуры и внешнего давления, образование биэкситонов и многочастичных кластеров, а также при очень высоких плотностях кристаллизация дырок. На основе результатов моделирования была непротиворечиво объяснена фазовая диаграмма для  $\text{TmSe}_{0,45}\text{Te}_{0,55}$ . Было также проведено подробное изучение кристаллизации в зависимости от параметров и предложена плазменная фазовая диаграмма. Исследование кристаллизации дырок представляет большой физический интерес в связи с возникновением фононов, порождаемых решеткой дырок, и, как следствие, возможностью возникновения в этих условиях высокотемпературной сверхпроводимости.

Рассмотрим расчет свойств электронно-дырочной плазмы, возникающей в полупроводящей эвтектике  $\text{TmSe}_{0,45}\text{Te}_{0,55}$  под внешним давлением на примере работы [47]. Фазовая диаграмма электронно-дырочной плазмы этого вещества показана на рис. 5.15.

Видно, что при увеличении давления при температуре, ниже некоторой критической, образуется так называемый экситонный изолятор. Такой переход сопровождается уменьшением проводимости, так как носители заряда (электроны и дырки) связываются в нейтральные частицы, называемые экситонами. При дальнейшем увеличении давления происходит переход Мотта с повышением проводимости («ионизация давлением»). При температурах выше критической переход в проводящее состояние осуществляется непрерывно.

В работе [47] было проведено моделирование квантовым методом Монте–Карло различных состояний на фазовой диаграмме. Электронно-дырочная плазма представлялась в виде смеси электронов и дырок с постоянными эффективными массами:  $m_{e,ef} = 2,1m_e$ ,  $m_{h,ef} = 80m_e$ ,  $M = m_h/m_e$ . Диэлектрическая проницаемость среды принималась равной  $\epsilon = 25$ , для некоторых расчетов также использовалось значение  $\epsilon = 10$ .

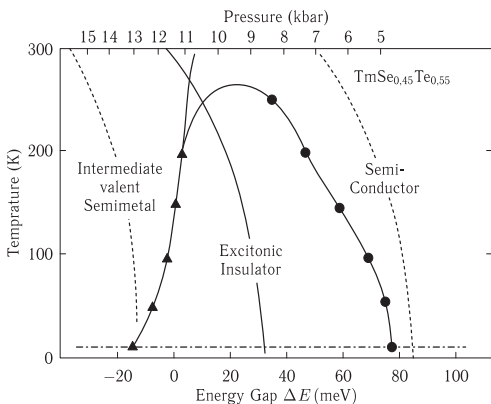


Рис. 5.15. Фазовая диаграмма электронно-дырочной плазмы  $\text{TmSe}_{0,45}\text{Te}_{0,55}$  [48]

На рис. 5.16 показаны конфигурации частиц в ячейке Монте-Карло. Частицы в этих конфигурациях представляют собой облако точек, размер которого определяется тепловой длиной волны соответствующей частицы. Показаны конфигурации для различных значений параметра Бракнера  $r_s = d/a_B$ , где  $d$  — среднее межчастичное расстояние,  $d = [3/4\pi(n_e + n_h)]^{1/3}$ ,  $a_B$  — радиус Бора для среды (с учетом диэлектрической проницаемости).

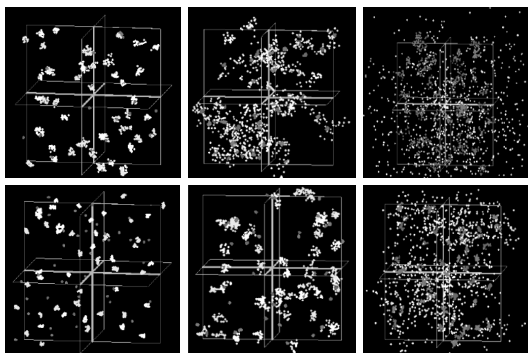


Рис. 5.16. Равновесные конфигурации Монте-Карло в различных условиях. Верхний ряд:  $T = 50 \text{ K}$ ,  $r_s = 10, 4, 1$ . Нижний ряд:  $T = 200 \text{ K}$ ,  $r_s = 10, 4, 1$

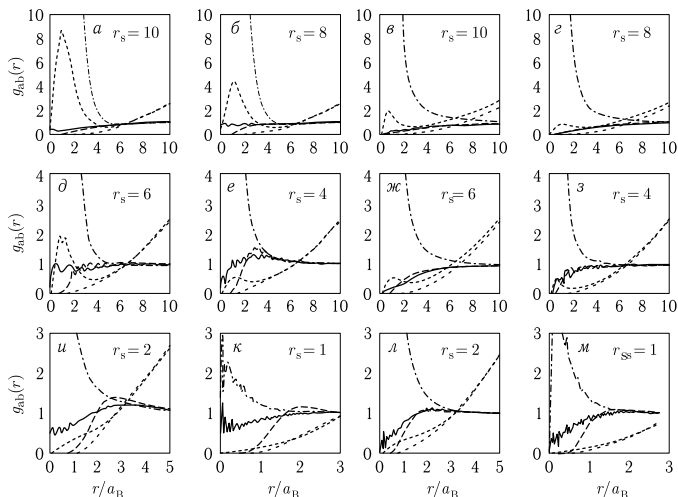


Рис. 5.17. Парные корреляционные функции электронно-дырочной плазмы в различных условиях. Первые две колонки —  $T = 50$  К, третья и четвертая —  $T = 200$  К [48]

На рис. 5.17 показаны парные корреляционные функции, в том числе для конфигураций, изображенных на рис. 5.16. Хорошо видны отличия для случая низких (50 К) и высоких (200 К) температур. Так, при  $T = 50$  К отчетливо заметен пик, связанный с существованием экситонов, на функции  $r^2 g_{eh}$ , который наибольшую высоту имеет при самой низкой плотности  $r_s = 10$ . Для  $r_s = 6$  высота пика уменьшается из-за появления биэкситонов. При еще более высоких плотностях  $r_s = 4 \div 2$  парные корреляционные функции  $g_{ee}$  и  $g_{hh}$  имеют максимумы при  $r = 2a_B$  и  $4a_B$ , свидетельствуя, соответственно, о заметной концентрации экситонов и биэкситонов. Наконец, при самой большой плотности  $r_s = 1$  экситоны и биэкситоны распадаются из-за многочастичных эффектов, связанных с ионизацией давлением и близостью к переходу Мотта.

Качественный анализ корреляционных функций, приведенный в предыдущем абзаце, можно обосновать и количественными расчетами. Так, произведение  $r^2 g_{eh}(r)$  имеет смысл вероятности найти электрон на расстоянии  $r$  от дырки. Грубая оценка доли связанных состояний приводит к формуле

$$\frac{N_b^{\text{eh}}}{N_b^{\text{eh}} + N_c^{\text{eh}}} = \frac{\int_0^{R_b} r^2 [g_{eh}(r) - 1] dr}{\int_0^{R_b} r^2 g_{eh}(r) dr},$$

где  $R_b$  — расстояние, на котором  $g_{eh}(r) - 1 > 0$ . Аналогично оценивается доля связанных состояний дырка-дырка:

$$\frac{N_b^{hh}}{N_b^{hh} + N_c^{hh}} = \frac{\int_{R'_b}^{R_b} r^2 [g_{hh}(r) - 1] dr}{\int_{R'_b}^{R_b} r^2 g_{hh}(r) dr},$$

где  $R'_b$  — расстояние, на котором  $g_{hh}(r) - 1 > 0$ .

Результаты расчетов показаны на рис. 5.18 и 5.19. Хорошо видно, что для маленькой плотности,  $r_s > 6$ , и низкой температуры ( $T < 100$  K) практически все электроны и дырки связаны в экситоны. Увеличение температуры ( $T > 100$  K) приводит к ионизации экситонов. Независимо от температуры при  $r_s > 6$  практически нет биэкситонов и многочастичных кластеров.

Для промежуточных плотностей,  $2 < r_s < 6$ , при низкой температуре ( $T < 100$  K) доля биэкситонов и многочастичных кластеров резко возрастает, в то время как концентрация экситонов уменьшается. При высокой плотности,  $r_s \approx 1$ , независимо от температуры все связанные состояния разрушаются из-за перекрытия электронных оболочек, и в системе происходит переход Мотта. Предполагая, что при переходе количество связанных состояний не превышает 10% и не зависит от температуры, из рис. 5.18 можно оценить, что это происходит при концентрации  $10^{21}$  см<sup>-3</sup>. Также из рис. 5.18 и 5.19 следует, что при температуре 300 K связанные состояния полностью исчезают, поэтому температуру 300 K можно считать верхней границей критической температуры перехода в рассматриваемой электронно-дырочной плазме. Более

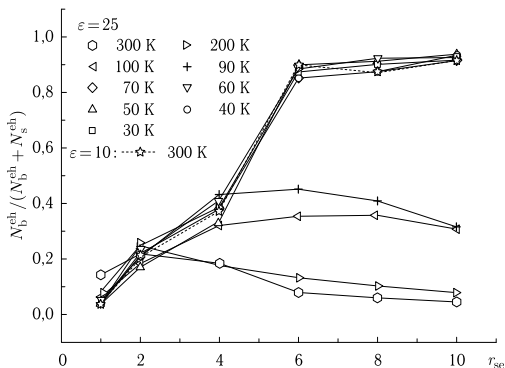


Рис. 5.18. Доля связанных состояний электрон-дырка в полупроводнике  $TmSe_{0,45}Te_{0,55}$ ,  $M = 40$ , в зависимости от параметра Бракнера

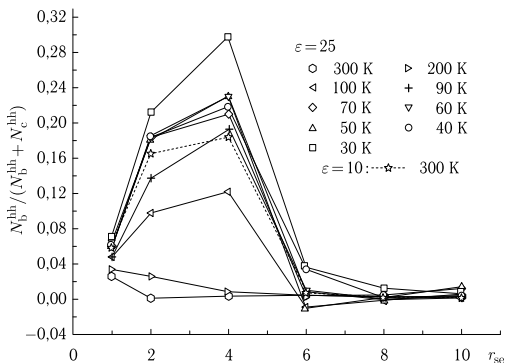


Рис. 5.19. Доля связанных состояний дырка-дырка в полупроводнике  $\text{TmSe}_{0,45}\text{Te}_{0,55}$ ,  $M = 40$ , в зависимости от параметра Бракнера

подробный анализ показывает, что критическая температура лежит в диапазоне 200–300 К. Эти выводы находятся в качественном согласии с фазовой диаграммой, показанной на рис. 5.15.

Дальнейшее увеличение плотности может приводить к кристаллизации дырок в электронно-дырочной плазме.

## 5.6. Кристаллизация дырок

Как мы это уже обсуждали в предыдущей главе, кристаллизация является одним из фундаментальных свойств вещества. Около 80 лет назад Вигнер [49] теоретически предсказал возможность образования электронного кристалла, и с тех пор ведется активный поиск этого явления в природе. Так, кристаллизация электронов наблюдалась на поверхности холодных гелиевых капель [50], в гетероструктурах полупроводников в сильных магнитных полях [51], а также предсказана в квантовых точках полупроводников [52]. Недавно была предсказана кристаллизация дырок в полупроводниках с высокой критической температурой [53]. Между тем, вигнеровская (кулоновская) кристаллизация является фундаментальным свойством любых систем заряженных частиц; так, кристаллизацию наблюдали экспериментально в ультрахолодной плазме в ловушках [54, 55] и накопительных кольцах [56]. Необходимым условием существования кристалла в однокомпонентной плазме (ОКП) является значительное превышение средней потенциальной энергии  $e^2/r_a$  над средней кинетической ( $dkT/2$  для классической плазмы или  $E_F$  для квантовой). Здесь  $r_a$  — среднее межчастичное расстояние,  $r_a \sim n^{-1/d}$ ,  $d$  — размерность системы. Критические значения параметра неидеальности, полученные в результате численного моделирования, для классической ОКП  $\Gamma^c = 175$  в трехмерном и  $\Gamma^c = 137$  в двумерном случаях [50, 57]. Для квантовой ОКП при нулевой температуре кристалл образуется при плотности,

определяемой параметром Бракнера,  $r_s = r_a/a_B$ , где  $a_B$  — боровский радиус системы с учетом диэлектрической проницаемости среды; в двумерном случае плотность кристаллизации соответствует  $r_s = 33$ , а в трехмерном  $r_s = 100$  (160) для фермионов (бозонов) [58, 59].

Большинство кулоновских систем во Вселенной представляет собой нейтральную плазму, которая состоит минимум из двух противоположно заряженных компонент (двухкомпонентная плазма, ДКП). Интересен, например, вопрос, возможно ли образование кристалла в ДКП и при каких условиях. Так, некоторые астрофизические модели предсказывают существование квантовых ионных кристаллов, окруженных вырожденным электронным газом, в недрах белых карликов и коре нейтронных звезд [60]. Такие квантовые двухкомпонентные кристаллы не обнаружены в лабораторных условиях в электрон-ионной, электрон-позитронной и электронно-дырочной плазме. С другой стороны, примеры классических кристаллов в ДКП хорошо известны, например, в коллоидной и пылевой [61–64], а также лазерно охлаждаемой [65, 66] плазме, но такие кристаллы существуют при значительно меньших плотностях, то есть в условиях, когда частицы подчиняются классической статистике.

Общим свойством для всех вышеперечисленных классических кристаллов в ДКП является большая масса и заряд одних частиц по сравнению с другими. Однако открытым остается вопрос, какую роль играют эти факторы для образования кристалла в классическом и квантовом случаях. Ответ на этот вопрос, по-видимому, может дать только компьютерное моделирование. С помощью расчетов квантовым методом Монте–Карло убедительно продемонстрирована возможность образования квантового кристалла и изучены условия его существования. В частности, показано, что формирование кристалла можно ожидать при достаточно большом отношении массы тяжелой частицы к массе легкой, а также при достаточно низких температурах.

Моделирование кристаллизации в кулоновской квантовой системе является весьма сложной задачей: необходимо самосогласованно учесть кулоновское взаимодействие, образование связанных состояний, а также квантовые и спиновые эффекты тяжелой и легкой компонент. В работе [47] расчеты проводились квантовым методом Монте–Карло для плазмы с отношением масс тяжелой и легкой компонент,  $M = 1\text{--}2000$ , в диапазоне температур  $T = (0,06\text{--}0,6) T_b$  и плотностей  $r_s = 0,6\text{--}13$ . Здесь  $kT_b = e^2/(8\pi\epsilon_0\epsilon a_B)$  — энергия связи «атома», состоящего из тяжелой и легкой частиц противоположных зарядов (аналог энергии Ридберга в атоме водорода),  $\epsilon$  — эффективная диэлектрическая проницаемость системы,  $a_B = 4\pi\epsilon_0\epsilon h^2/\mu e^2$  — радиус Бора системы,  $\mu$  — приведенная масса,  $\mu = m_e/(1 + M)$ ,  $m_e$  — эффективная масса электрона,  $k$  — постоянная Больцмана. При моделировании положительные и отрицательные частицы считались квантовыми фермионами с зарядом  $\pm e$  и спином  $1/2$ . Таким образом, в результате моделирования можно было изучать свойства различных систем: электрон-позитронной, электронно-дырочной или водородной плазмы.

В расчетах квантовым методом Монте–Карло кристаллизация действительно наблюдалась, что подтверждает рис. 5.20, на котором показаны Монте–Карло конфигурации квантовых частиц в вычислительной ячейке для

одной и той же температуры и плотности, но при различных значениях отношения массы тяжелой частицы к легкой. В формализме квантового метода Монте–Карло частицы представляются в виде замкнутых ломаных, вершины которых образуют облако точек. Размер этого облака приблизительно соответствует тепловой длине волны де Бройля соответствующей частицы, поэтому тяжелые частицы имеют меньший размер в пространстве, чем легкие. На рисунке 5.20 показаны только вершины ломаных, которыми представлены тяжелые и легкие частицы с различным направлением спина. Для указанных условий моделирования электроны образуют практически однородный Ферми-газ; при этом волновой пакет электрона превышает размеры ячейки Монте–Карло; таким образом, тяжелые частицы принадлежат всем электронам одновременно. Расположение тяжелых частиц (дырок) в пространстве

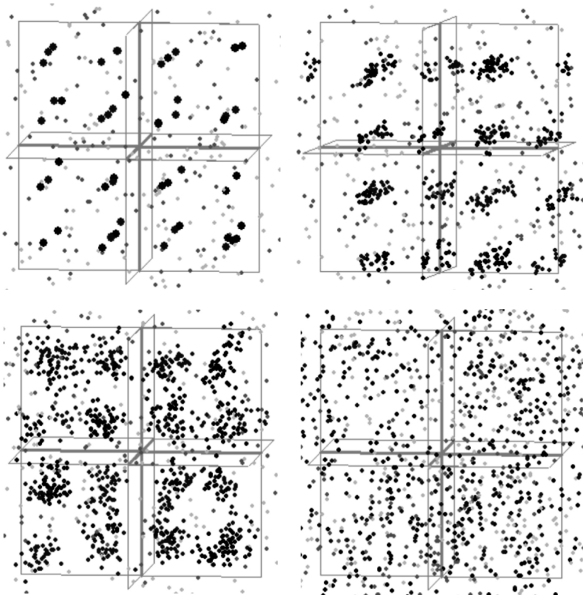


Рис. 5.20. Конфигурации Монте–Карло на равновесном участке в электронно-дырочной плазме при  $T/T_b = 0,096$  и  $r_s = 0,63$ .  $M = 800$  (верхний левый),  $M = 100$  (верхний правый),  $M = 50$  (нижний левый),  $M = 1$  (нижний правый). Точки — представления частиц в виде интегралов по траекториям (приведены только вершины замкнутых ломаных). Черные и темно-серые облака точек — дырки, серые и светло-серые точки — электроны с противоположным направлением спина. Линиями показаны границы ячейки Монте–Карло

меняется существенным образом: при  $M = 1$  дырки образуют квазигазовую структуру, при  $M = 50$  — жидкостноподобную, а при  $M = 100$  и 800 дырки упорядочиваются в пространстве. Таким образом, кристаллизация происходит между  $M = 50$  и 100. На рисунке хорошо заметен механизм этого фазового перехода: с увеличением  $M$  волновые пакеты отдельных дырок уменьшаются, а кристаллизация наступает, когда волновой пакет дырки достигает некоторого критического размера ( $M \approx 80$ ).

Для количественной иллюстрации процесса кристаллизации на рис. 5.21 изображены парные корреляционные функции  $g_{ab}(r)$ . Образование дальнего порядка при возрастании  $M$  от 1 до 100 отчетливо заметно на рис. 5.21 *a–z*. На рис. 5.21 *в* корреляционная функция дырка-дырка имеет только один выраженный пик, как в случае жидкости. При  $M = 800$  и 100 (рис. 5.21 *a, б*)  $g_{hh}(r)$  проявляет периодические осцилляции с большим отношением значений в максимуме и в минимуме, что типично для кристаллов. Кристалл существует в ограниченном диапазоне температур — при повышении температуры в 2 раза происходит плавление. Корреляционные функции  $g_{ee}$  в условиях дырочного кристалла имеют максимумы на малых расстояниях, что свидетельствует об образовании зонной структуры. Таким образом, качественно понятно, что кристалл существует при достаточно низких по сравнению с энергией связи

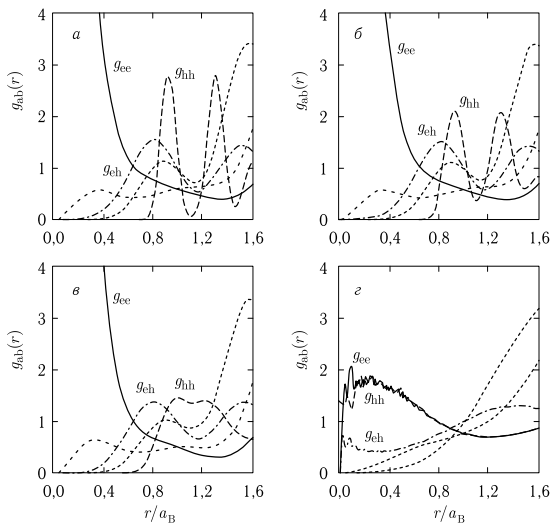


Рис. 5.21. Парные корреляционные функции электронно-дырочной плазмы,  $T = 0,064T_b$ ,  $r_s = 0,63$ . Значения  $M$  и расположение рисунков соответствуют рис. 5.20

температурах в ограниченном диапазоне плотностей и при отношении массы тяжелой частицы к легкой  $M > 60-80$ .

Можно проанализировать относительную флуктуацию среднего расстояния между дырками  $R$ . Этот параметр мал в кристаллической фазе из-за локализации дырок, а при плавлении достаточно резко возрастает (критерий Линдемманна). На рис. 5.22 показана зависимость  $R$  от отношения масс  $M$  в ДКП при  $r_s = 0,63$  и  $T = 0,064T_b$ . При большом отношении масс ( $M = 2000$ , что близко к водородной плазме)  $R$  существенно меньше 0,1; это соответствует кристаллическому состоянию.

Величина  $R$  практически не меняется вплоть до  $M = 150$ , а затем довольно быстро возрастает примерно в 3 раза. Таким образом, привычные представления о плавлении вполне применимы и к кулоновским квантовым кристаллам; в частности, кристалл плавится при повышении температуры.

Анализ корреляционных функций дырок с различным направлением спина позволяет выявить некоторые интересные свойства дырочного кристалла. На рис. 5.23 показаны парные корреляционные функции дырка-дырка; на рис. 5.23 а точечной линией представлена корреляционная функция, при построении которой учитывались дырки только с параллельными спинами, на рис. 5.23 б — только с антипараллельными. Для сравнения в обоих случаях также показана корреляционная функция без учета спина. Из рис. 5.23 хоро-

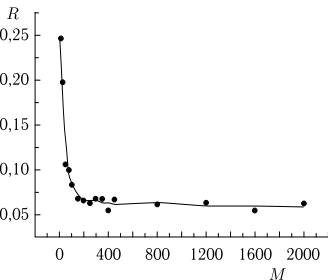


Рис. 5.22. Флуктуация расстояния между дырками, отнесенная к среднему межчастичному расстоянию, в зависимости от отношения масс дырки и электрона

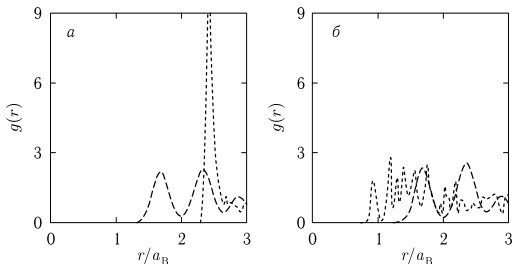


Рис. 5.23. Парные корреляционные функции электронно-дырочной плазмы,  $T = 0,002T_b$ ,  $r_s = 0,5$ . Пунктирные линии — парная корреляционная функция дырка-дырка для  $M = 400$ : а — точечная линия соответствует парной корреляционной функции дырка-дырка с параллельными спинами, б — с антипараллельными спинами для  $M = 100$

шо видно, что все дырки с параллельными спинами расположены примерно на одном и том же расстоянии друг от друга, тогда как дырки с антипараллельными спинами достаточно хаотично расположены в объеме ячейки. Это свидетельствует о том, что дырки образуют две вложенные решетки, каждая из которых содержит частицы с одной и той же проекцией спина. Физическая причина этого явления состоит в сильном ферми-отталкивании частиц с одинаковыми спинами.

Критерий существования кристалла в двухкомпонентной плазме можно получить, воспользовавшись результатами моделирования для однокомпонентной плазмы. Так, в классической однокомпонентной плазме кристалл существует, если параметр неидеальности превышает некоторое критическое значение  $\Gamma^c$ . С другой стороны, в квантовой однокомпонентной плазме кристалл образуется при плотностях, меньше некоторой критической, характеризуемой параметром Бракнера  $r_s^c$ ,  $r_s > r_s^c$ . Кроме того, в системе должны отсутствовать связанные состояния, что при низких температурах (квантовая система) определяется условием ионизации давлением ( $r_s < r_s^{\text{Mott}} \approx 1,2$ ), а при повышении температуры условием термической ионизации (связанные состояния исчезают при  $T_e \approx 1$ , где  $T_e$  — безразмерная температура, измеряемая в энергиях ионизации). Ниже условие отсутствия связанных состояний будем записывать следующим образом:  $r_s < r_s^{\text{Mott}}(T_e)$ , подразумевая, что плотность, при которой образуются связанные состояния, уменьшается с ростом температуры. Можно показать, что вышеприведенные условия существования кристалла сводятся к следующим:

$$M > M^c(Z, T_e) = \frac{r_s^c}{Z^{4/3} r_s^{\text{Mott}}(T_e)} - 1, \quad (5.10)$$

где  $M$  — отношение массы тяжелой частицы к легкой, а  $Z$  — аналогичное отношение зарядов; диапазон плотностей определяется формулами

$$n^{(1)}(T_e) = \frac{3}{4\pi} \left[ \frac{1}{r_s^{\text{Mott}}(T_e)} \right]^3, \quad n^{(2)}(T_e) = n^{(1)}(T_e) K^3, \quad (5.11)$$

$$K = (M + 1) / (M^c + 1),$$

а температура должна быть ниже  $T^*$ ,

$$T^* = 6 \frac{Z^2 \Theta (M + 1)}{\Gamma^c r_s^c}, \quad (5.12)$$

где  $\Theta$  — отношение температуры легких частиц к температуре тяжелых.

Область существования кристалла в ДКП качественно характеризует приведенная на рис. 5.24 фазовая диаграмма температура–плотность. Кристалл существует при отсутствии связанных состояний, то есть при достаточно высоких плотностях. С другой стороны, при очень высоких плотностях, как показывают расчеты для ОКП, кристалл плавится. Классический кристалл в однокомпонентной плазме существует лишь при достаточно высоких значениях параметра связывания. Кроме того, кристалл может образовываться при достаточно высоком отношении масс тяжелой и легкой частиц. На рис. 5.24 показана область существования кристалла для  $M = 200$  и  $M = 100$ ; при еще

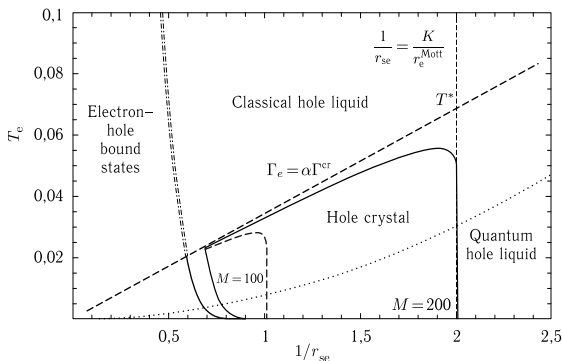


Рис. 5.24. Оценка фазовой диаграммы двухкомпонентной кулоновской плазмы [48]

более низких значениях  $M$  кристалл образоваться не может. Точечной линией условно показана граница между квантовой и классической системами.

## 5.7. Электронно-дырочная плазма германия

Существование фазового перехода в вырожденной неидеальной водородной плазме чрезвычайно трудно проверить на опыте. Однако фазовый переход в кулоновской системе сильно взаимодействующих квантовых частиц при определенных условиях можно наблюдать экспериментально. При воздействии лазерного излучения на тонкую пленку германия, охлажденную

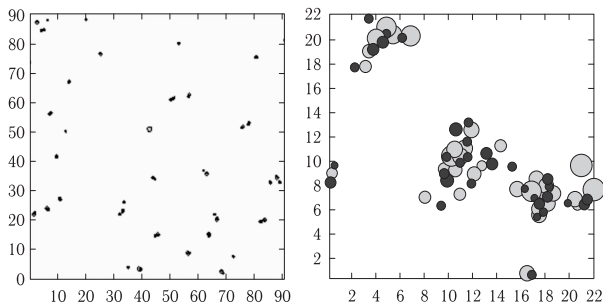


Рис. 5.25. Конфигурации ЭДП при 2D-моделировании квантовым методом Монте-Карло при температуре ниже критической [67]. Светлые точки — электроны, темные — дырки. а)  $n = 1,54 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ; б)  $n = 2,58 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$

до температуры жидкого гелия, происходит возбуждение электронов и дырок, причем получающаяся плазма может существовать достаточно продолжительное для наблюдения время [68]. При низких концентрациях электронов образуются экситоны (электронно-дырочные пары, ЭДП), такая плазма обладает низкой проводимостью. При повышении концентрации при температурах ниже критической система распадается на электронно-дырочные капли, наблюдаемые визуально. При дальнейшем увеличении концентрации плазма вновь становится однородной, причем ее фотопроводимость возрастает на 4–5 порядков [68]. Из-за чрезвычайно сложной зонной структуры германия свойства электронно-дырочной плазмы могут быть удовлетворительно описаны вырожденной системой дырок и электронов с постоянными эффективными

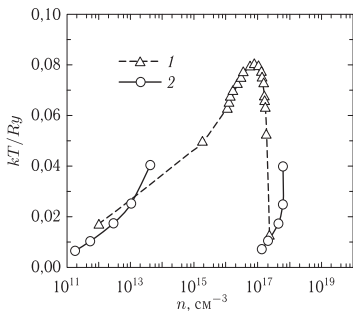


Рис. 5.26. Фазовая диаграмма электронно-дырочной плазмы германия. 1 — эксперимент [69], 2 — ММК [67]

массами только при температурах, достаточно низких по сравнению с критической. При этом эффективные массы дырок и электронов оказываются близкими, поэтому при моделировании и для дырок, и для электронов необходимо учитывать обменные эффекты. На рис. 5.25 приведены конфигурации электронно-дырочной плазмы для  $T = 0,1Ry$  при различных плотностях.

Квантовый метод Монте-Карло правильно предсказывает размеры электронов и дырок, а также воспроизводит образование электронно-дырочных капель. Расчеты изотерм электронно-дырочной плазмы германия при температурах ниже критической,  $T_c = 6,5K$ , позволили определить границы области плохой сходимости к равновесному состоянию. Рисунок 5.26 иллюстрирует результаты моделирования. Точкам на кривых 2 при заданной температуре соответствуют концентрации, ограничивающие область фазового перехода. Видно, что расчетная фазовая граница хорошо согласуется с экспериментальными данными [69].

## 5.8. Квантовая молекулярная динамика

В главе 2 мы коснулись метода молекулярной динамики для описания классических систем типа газов и простых жидкостей. Вместе с тем, применение этого метода для квантовых структур требует существенного развития этого подхода, которое мы кратко обсудим в этом разделе.

Метод квантовой молекулярной динамики, впервые предложенный в работе [70], и его последующие модификации широко используются для расчета различных свойств сильно неидеальных сред. Это стало возможным благода-

ря тому, что силы, действующие на ионы, рассчитываются на основе решения многоэлектронной квантовомеханической задачи.

Рассмотрим систему классических ионов с координатами  $\{\mathbf{R}_I\}$ , массами  $M_I$  и энергией взаимодействия  $E[\{\mathbf{R}_I\}]$  и запишем для них уравнения движения Ньютона:

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{R}_I} = \mathbf{F}_I[\{\mathbf{R}_J\}]. \quad (5.13)$$

Эта система уравнений решается численно, например, с помощью алгоритма Верле [71]. Ключевое свойство этого и других подобных алгоритмов состоит в том, что энергия системы частиц сохраняется с хорошей точностью в течение всего времени моделирования при условии удачного выбора шага интегрирования  $\Delta t$ . Силы, действующие на ионы, определяются как положениями ионов, так и электронов. В классической молекулярной динамике эти силы определяются эффективными потенциалами взаимодействия. Для сложных систем эффективные потенциалы могут содержать большое число параметров, определяемых из эксперимента или из сравнения с более точными квантовомеханическими расчетами.

Прогресс, достигнутый в методах расчета электронной структуры вещества, дает возможность рассчитывать силы, действующие на ионы со стороны электронов, без привлечения дополнительных аппроксимаций. Такие методы расчета, называемые в литературе «первопринципными» (*ab initio*), основаны на приближении Борна-Оппенгеймера. В рамках этого приближения электронная плотность рассчитывается при неподвижных ионах, а ионы двигаются под действием сил со стороны электронов при неподвижных электронах.

В работе [70] впервые были объединены задачи нахождения электронной плотности при подвижных ионах. Это позволило осуществлять поиск равновесных структур, изучать тепловое движение ионов, моделировать фазовые переходы и т.п. С другой стороны, алгоритм работы [70] не описывает динамику электронов, а предназначен для поиска основного состояния многоэлектронной системы при движущихся ионах. Для этого в лагранжиан системы, помимо энергии взаимодействия электронов и кинетической энергии ионов, включается фиктивная кинетическая энергия электронов:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (2\mu) \int d\mathbf{r} |\dot{\psi}_i(\mathbf{r})|^2 + \sum_I \frac{1}{2} M_I \dot{\mathbf{R}}_I^2 - E[\psi_i, \mathbf{R}_I] + \sum_{ij} \Lambda_{ij} \left[ \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) - \delta_{ij} \right]. \quad (5.14)$$

Последний член в уравнении (5.14) является существенным для учета условия нормировки электронных волновых функций. Из лагранжиана (5.14) следуют уравнения движения как для электронов, так и для ионов:

$$\mu \ddot{\psi}_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{\delta E}{\delta \psi_i^*(\mathbf{r})} + \sum_k \Lambda_{ik} \psi_k(\mathbf{r}, t) = -H \psi_i(\mathbf{r}, t) + \sum_k \Lambda_{ik} \psi_k(\mathbf{r}, t), \quad (5.15)$$

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I = \mathbf{F}_I = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{R}_I}. \quad (5.16)$$

Уравнения (5.15)–(5.16) являются аналогами уравнений Ньютона и решаются аналогично уравнениям метода классической молекулярной динамики [71]. Массы ионов совпадают с их физическими массами, а «массы» электронов  $\mu$  выбираются из условия быстрой сходимости к основному состоянию.

Существует несколько потенциальных недостатков подхода [70]. Главный из них — очень маленький временной шаг  $\Delta t$ , необходимый в большинстве случаев для интегрирования уравнений (5.15)–(5.16). Кроме того, следует отметить, что из-за введения фиктивной кинетической энергии электронов в лагранжиан (5.14) в некоторых ситуациях происходит нефизическая перекачка энергии в электронные степени свободы. Поэтому значительно более широкое распространение получила другая формулировка метода квантовой молекулярной динамики.

Уравнения движения для ионов (5.13) могут быть решены, если известны силы, действующие на ионы. Для этого обычно используется теорема Гелл-Манна–Фейнмана [72] и специально разработанные для этой цели быстрые алгоритмы [73, 74]. В отличие от метода [70], в настоящее время гораздо чаще используются различные алгоритмы для вычисления траекторий движения ионов и нахождения электронной плотности. Такое разделение имеет свои преимущества и недостатки. Так, молекулярно-динамический шаг по времени для интегрирования уравнений движения для ионов можно выбирать достаточно большим, с другой стороны, распределение электронной плотности при заданных положениях ионов необходимо вычислять гораздо точнее, чем в алгоритме [70]. Тем не менее, существующие в настоящее время пакеты программ чаще всего используют именно этот подход.

Термодинамические функции ионов, в частности, энергия и давление, вычисляются стандартным для классической молекулярной динамики методом [71] посредством усреднения по достаточно большому числу конфигураций. Энергия каждой конфигурации определяется суммой энергий парных взаимодействий ионов, а давление — по теореме вириала.

Метод квантовой молекулярной динамики может применяться для моделирования неупорядоченных систем, в том числе жидкости и плазмы. Весьма интересные результаты получены при моделировании плавления металлов: натрия [80], алюминия [81] и железа [82]. Чаще всего такое моделирование осуществляется с помощью однофазного подхода, при котором каким-либо образом регистрируется плавление изначально кристаллического вещества, однако делаются попытки провести и двухфазное моделирование, при котором жидкая и твердая фазы приводятся в равновесие при заданном давлении [81]. В качестве примера на рис. 5.27 приведена кривая плавления алюминия в сравнении с экспериментальными данными.

Методом квантовой молекулярной динамики получено большое количество результатов при моделировании термодинамических свойств различных веществ в области жидкости и плазмы. В частности, проведены расчеты ударных адиабат водорода [83], дейтерия [84, 85] и гелия [86, 87], кварца [88] и углерода [89] в твердой и жидкой фазах, изучена фазовая диаграмма воды при высоких температурах и давлениях [90], проведены расчеты изохор плазмы различных металлов [91–93]. В качестве примера на рис. 5.28 приведены изотермы водородной плазмы при различных температурах.

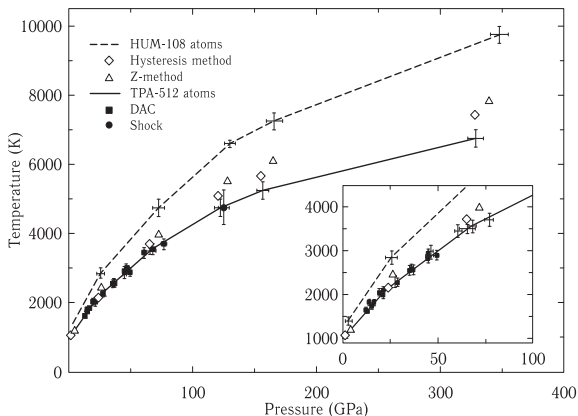


Рис. 5.27. Кривые плавления алюминия. Сплошная линия — двухфазное моделирование (512 частиц), штриховая линия — однофазное моделирование. Экспериментальные данные: подогреваемые алмазные наковальни — [75, 76], плавление в ударной волне — [77]

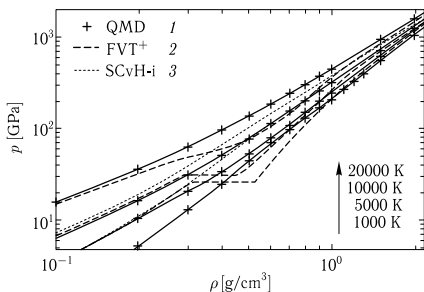


Рис. 5.28. Изотермы водородной плазмы. 1 — квантовая молекулярная динамика, 2 (штриховая линия) — вариационная теория жидкости [78], 3 — химическая модель плазмы [79]

## 5.9. Моделирование кварк-глюонной плазмы

Изучение свойств кварк-глюонной плазмы (КГП) является чрезвычайно сложной задачей физики высоких плотностей энергии, как с теоретической, так и экспериментальной точек зрения. Оставляя детальное обсуждение свойств этого экзотического состояния материи до гл. 12, здесь мы коснемся только применения метода Монте-Карло для численного моделирования КГП.

Свойства КПП исследовались экспериментально на релятивистском тяжелоионном коллайдере (RHIC) в Брукхейвене. Наиболее интересный результат, полученный из анализа экспериментальных данных, состоит в том, что кварк-глюонное вещество представляет собой скорее идеальную жидкость, чем идеальный газ, что можно было бы ожидать из теории асимптотической свободы [94]. Возможно, что пространственные корреляционные эффекты в КПП могут приводить к образованию упорядоченных структур, сходных с таковыми в плотной жидкости. Подобные структуры наблюдались ранее в электромагнитной плазме.

Существуют различные подходы для изучения КПП, каждый из которых имеет свои преимущества и недостатки. Наиболее прямолинейный путь для изучения свойств сильно-неидеальной КПП — численный расчет интегралов по полям, которые получаются в рамках квантовой хромодинамики (КХД) [95–97]. Интерпретация этих чрезвычайно сложных вычислений требует привлечения различных упрощенных моделей, кроме того, расчеты в рамках КХД возможны только при малых значениях барионного химического потенциала и в условиях термодинамического равновесия.

Квазиклассический подход, основанный на введении концепции квазичастиц, был предложен в [98–101]. Ожидается, что основные свойства неабелевой плазмы могут быть описаны в рамках квазиклассического приближения, при этом сложности, присущие квантовомеханическим расчетам в рамках квантовой теории поля, не возникают. Сходные идеи использовались в рамках классического метода молекулярной динамики (МД) [102]. Недавно этот подход был развит в серии работ [103–107].

На основе этих представлений была сформулирована классическая нерелятивистская модель КПП с цветным кулоновским взаимодействием [103], которая анализировалась в расчетах методом МД. Квантовые эффекты при этом игнорировались или учитывались феноменологически посредством потенциала короткодействующего отталкивания между квазичастицами. Такой достаточно грубый подход может давать неверные результаты при высоких плотностях. Для температур и плотностей, рассмотренных в работе [103], эти эффекты очень важны, так как тепловая длина волны квазичастицы по порядку величины сравнима со средним межчастичным расстоянием.

Значительный интерес представляет обобщение классической модели [103] на случай квантовых квазичастиц [108]. Подход основан на методе Монте-Карло с использованием интегралов по траекториям (РМС) с последовательным учетом статистики Ферми (Бозе) для кварков (глюонов) и квантовых эффектов во взаимодействии квазичастиц.

Рассмотрим модель, основанную на работе [103]. Ее основные положения можно сформулировать следующим образом.

1. Все цветные квазичастицы являются тяжелыми ( $m > T$ ), где  $m$  — масса квазичастицы,  $T$  — температура, поэтому релятивистскими эффектами можно пренебречь. Это предположение основано на анализе расчетов в рамках КХД [109, 110].

2. Так как частицы являются нерелятивистскими, межчастичное взаимодействие описывается цветным кулоновским потенциалом. Эффекты, связанные с магнитным полем, не учитываются.

3. Операторы цвета трактуются в квазиклассическом приближении, т. е. заменяются классическими цветными векторами, временная эволюция которых описывается уравнениями Вонга [111].

Справедливость сделанных приближений и их ограничения обсуждались в работе [103]. Для этой модели требуются следующие величины в качестве входных параметров: 1) масса квазичастицы  $m$  и 2) константа связи  $g^2$ . Все входные параметры необходимо определить из расчетов на решетке в рамках КХД или из других моделей, основанных на этих данных.

Таким образом, мы рассматриваем трехкомпонентную КПП, которая состоит из  $N_q$  тяжелых (окруженных глюонами) кварков,  $N_{\bar{q}}$  антикварков и  $N_g$  глюонов. В термодинамическом равновесии средние значения чисел частиц могут быть найдены в большом каноническом ансамбле, в котором гамилтониан зависит от температуры и может быть записан в виде  $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$ . Кинетическая и потенциальная энергия взаимодействия квазичастиц имеют следующий вид:

$$\hat{K} = \sum_i \left[ m_i(T, \mu_q) + \frac{p_i^2}{2m(T, \mu_q)} \right], \quad \hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{g^2 (|r_i - r_j|, T, \mu_q) < Q_i | Q_j >}{2\pi |r_i - r_j|}.$$

Здесь  $Q_i$  обозначает классический цветовой вектор Вонга,  $T$  — температура и  $\mu_q$  — химический потенциал кварка. Фактически, масса квазичастицы и константа связи, получаемые из решеточных моделей, являются функциями  $T$  и, в общем случае,  $\mu_q$ . Более того,  $g^2$  является функцией расстояния  $r$ , что приводит к линейному росту потенциала при больших  $r$  [112]. Термодинамические свойства в большом каноническом ансамбле при заданной температуре  $T$ , химическом потенциале  $\mu_q$  и объеме  $V$  полностью описываются следующей статсуммой:

$$Z(\mu, \beta, V) = \sum_{N_q, N_{\bar{q}}, N_g} \frac{\exp(\mu_q(N_q - N_{\bar{q}})/T)}{N_q! N_{\bar{q}}! N_g!} \sum_{\sigma} \int_v dr dQ \rho(r, Q, \sigma, N_q, N_{\bar{q}}, N_g, \beta),$$

где  $\rho(r, Q, \sigma, N_q, N_{\bar{q}}, N_g, \beta)$  обозначают диагональные матричные элементы оператора плотности  $\rho = \exp(-\beta \hat{H})$ . Здесь  $\sigma$ ,  $r$  и  $Q$  — спин, координата и цветовой вектор кварков, антикварков и глюонов, соответственно. Для того, чтобы вычислить термодинамические функции, в частности, внутреннюю энергию или среднюю плотность  $n_a = \langle N_a \rangle / V$ , нужно продифференцировать логарифм статсуммы по соответствующим термодинамическим параметрам.

Как и для электромагнитной плазмы, точное выражение для матрицы плотности неидеальной квантовой системы можно получить с использованием интегралов по траекториям [5, 113] на основе операторного тождества  $\exp(-\beta \hat{H}) = \exp(-\Delta \beta \hat{H}) \dots \exp(-\Delta \beta \hat{H})$ , где правая часть содержит  $(n+1)$  одинаковых сомножителей,  $\Delta \beta = \beta(n+1)$ , что позволяет переписать выражение, как и ранее, в виде интеграла по траекториям. Спины квазичастиц учитываются в спиновой части матрицы плотности, а обменные эффекты описываются операторами перестановки, действующими на пространственные, спиновые и цветовые координаты кварка, антикварка и глюона.

Соответственно, каждая частица представляется набором пространственных, спиновых и цветовых координат. Доминирующие вклады в статсумму дают конфигурации квазичастиц, в которых «размер» облака точек, представляющих квазичастицу, по порядку величин сравним с тепловой длиной волны; характерные расстояния между точками в облаке порядка тепловой длины волны при температуре в  $(n + 1)$  раз выше заданной.

Расчеты ММК проводились при нулевом барионном химпотенциале  $\mu_q = 0$ , кроме того, в модель были внесены дополнительные упрощения [103].

1. Используется канонический ансамбль вместо большого канонического. Термодинамические свойства в каноническом ансамбле при заданных температуре  $T$  и объеме  $V$  полностью описываются оператором плотности  $\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{H})$ , который, в свою очередь, определяет статсумму системы:

$$Z(N_q, N_{\bar{q}}, N_g, \beta, V) = \frac{\sum_{\sigma} \int_V dr dQ \rho(r, Q, \sigma, N_q, N_{\bar{q}}, N_g, \beta)}{N_q! N_{\bar{q}}! N_g!}.$$

2. Так как массы кварков различных ароматов, определяемые в КХД-расчетах на решетке, очень близки, то массы всех кварков считаются одинаковыми. Более того, массы кварков и глюонов считаются одинаковыми в соответствии с результатами решеточных расчетов [109, 110].

3. Так как массы кварков, антикварков и глюонов одинаковы, и все квазичастицы имеют приблизительно равное число степеней свободы, предполагается, что количество квазичастиц каждого сорта одинаково:  $N_q \sim N_{\bar{q}} \sim N_g$ .

4. Для упрощения расчетов используется цветовая группа  $SU(2)$  вместо  $SU(3)$ .

Таким образом, для замыкания модели требуется еще одна величина: плотность квазичастиц  $(N_q + N_{\bar{q}} + N_g)/V = n(T)$  как функция температуры.

Наиболее последовательный способ определения параметров модели состоит в привлечении данных решеточных расчетов в рамках КХД, однако в настоящее время это представляется затруднительным. Поэтому в расчетах ММК используются приближенные зависимости для входных данных. Согласно работе [103, 110], параметризация массы квазичастицы может быть выбрана следующей:  $m(T)/T_c = \frac{0,9}{(T/T_c - 1)} + 3,45 + 0,4(T/T_c)$ , где  $T_c = 175$  МэВ — критическая температура. Эта параметризация согласуется с массой кварка при двух значениях температуры, полученных в решеточных расчетах [109]. Согласно [109], массы квазичастиц весьма велики:  $m_q/T \approx 4$  и  $m_g/T \approx 3,5$ . Эти значения существенно больше, чем массы, требующиеся для квазиклассического описания [114, 115] решеточных расчетов термодинамических свойств КПП:  $m_q/T \approx 1 - 2$  и  $m_g/T \approx 1,3$ . Более того, в недавней работе [116] из решеточных расчетов получена масса кварка  $m_q/T \approx 0,8$ . Тем не менее, в данной работе используется параметризация [103, 110] для того, чтобы провести сравнение с данными МД работы [103]. Зависимость массы квазичастицы от температуры показана на рис. 5.29 (слева).

Плотность квазичастиц, необходимая для проведения расчетов в каноническом ансамбле, была выбрана с помощью зависимости  $n(T) = 0,24T^3$ . На первый взгляд, это весьма низкая плотность. К примеру, в классиче-

ских расчетах [103] плотность определялась по формуле  $n(T)/T^3 = 6,3$ , что соответствует плотности идеального газа безмассовых кварков, антикварков и глюонов. Так как массы квазичастиц весьма велики в рассматриваемой модели (также, как и в работе [103]), последняя зависимость сильно завышает плотность. Даже в квазичастичных моделях [114, 115] с меньшими значениями масс используются более низкие значения плотности  $n(T)/T^3 \approx 1,4$ . Параметризация  $m(T)$ , приведенная выше, дает даже большие значения массы, чем в работе [114, 115], — выбранная зависимость  $n(T)$  не является нереалистичной. Зависимость  $n(T)$  задавалась посредством среднего межчастичного расстояния  $r_s(T)$  в единицах  $\sigma = 1/T_c = 1,1$  Ферми (радиус Вигнера–Зейтца). Следует отметить, что выбранная зависимость для  $n(T)$  соответствует соотношению  $r_s(T) = 1$ .

Константа связи, используемая в расчетах ММК, выбиралась из условия наилучшего согласия вычисленного давления с соответствующими результатами решеточных расчетов (см. рис. 5.29 (справа)), она также приведена на рис. 5.29. Такие значения  $g^2$  примерно согласуются с данными решеточных расчетов [116]. Таким образом, сравнение с данными решеточных расчетов по уравнению состояния (рис. 5.29 справа) использовалось для оптимизации параметров модели с целью предсказания различных свойств КПП, включая внутреннюю структуру и, в дальнейшем, неравновесные свойства.

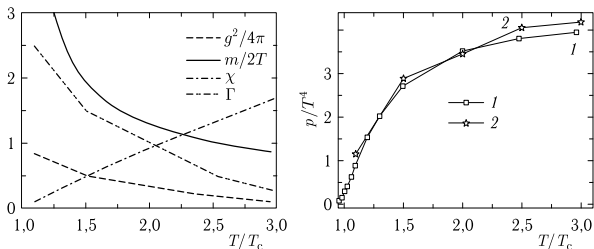


Рис. 5.29. Слева: зависимость от температуры входных параметров модели и параметра неидеальности КПП. Справа: уравнение состояния (зависимость давления от температуры) КПП, полученное по результатам РИМС-моделирования в сравнении с данными решеточных расчетов [95, 97]

Заметим, что хотя зависимости параметров модели не являются бесспорными, их можно назвать самосогласованными. В дальнейшем планируется исключить зависимость плотности от температуры  $n(T)$  из списка параметров посредством перехода к большому каноническому ансамблю.

Параметр неидеальности  $\Gamma$ , определяемый как отношение средней потенциальной энергии к средней кинетической и вычисленный для вышеописанных зависимостей параметров модели от температуры, также показан на рис. 5.29 слева. Его значение оказалось порядка единицы, что подтверждает, что КПП является неидеальной кулоновской жидкостью, а не газом. В изучаемом диапазоне температур,  $1 < T/T_c < 3$ , КПП является также вырожденной,

так как параметр вырождения  $\chi = n\lambda^3$  (где  $\lambda$  — тепловая длина волны квазичастиц) изменяется от 0,1 до 1,7 (рис. 5.29 слева).

Детали моделирования методом Монте-Карло с использованием интегралов по траекториям обсуждались выше. Основная идея состоит в генерации марковского процесса, в котором последующая конфигурация получается из предыдущей изменением координат частиц. Для КПП при генерации конфигураций используются также цветовые переменные  $Q$  всех частиц в соответствии с групповой мерой. Длина последовательности конфигураций выбирается такой, чтобы обеспечить сходимость термодинамических величин. При моделировании используется кубическая ячейка с периодическими граничными условиями. Число частиц выбиралось равным  $(N_q + N_{\bar{q}} + N_g) = 40 + 40 + 40 = 120$ , а число высокотемпературных сомножителей в операторном тождестве  $n = 20$ .

Представление о пространственном распределении квазичастиц в КПП можно составить, изучая парные корреляционные функции  $g_{ab}(r)$ . Они определяют плотность вероятности найти пару частиц типов  $a$  и  $b$  на заданном расстоянии  $r$  и могут быть записаны следующим образом:

$$g_{ab}(R_1 - R_2) = \frac{1}{ZN_q!N_{\bar{q}}!N_g!} \sum_{\sigma} \int dr dQ \delta(R_1 - r_1^a) \delta(R_2 - r_2^b) \rho(r, Q, \sigma, \beta).$$

Парные корреляционные функции зависят только от разности координат квазичастиц из-за изотропности системы. В классической системе невзаимодействующих частиц  $g_{ab}(r) \approx 1$ , тогда как взаимодействие и эффекты квантовой статистики приводят к перераспределению положения частиц. Результаты для парных корреляционных функций при температуре  $T/T_c = 3$  показаны в верхнем ряду рис. 5.30. Парные корреляционные функции одинаковых частиц представлены в верхнем левом углу рис. 5.30. На больших расстояниях  $r > 0,5\sigma$ , все парные корреляционные функции совпадают, стремясь к единице.

Сильное различие в поведении парных корреляционных функций кварков и глюонов (парная корреляционная функция антикварков идентична таковой для кварков) возникает на малых расстояниях. Если парная корреляционная функция глюонов монотонно возрастает при уменьшении расстояния до нуля, парная корреляционная функция кварков (и антикварков) имеет широкий максимум. В условиях моделирования тепловая длина волны  $\lambda$  приблизительно равна  $0,37\sigma$ , т. е. различие проявляется на расстояниях порядка  $\lambda$ . Увеличение населенности парных состояний глюонов на малых расстояниях объясняется проявлением эффектов статистики Бозе и эффектом притяжения, описываемым цветным кулоновским потенциалом. Напротив, уменьшение парной корреляционной функции кварков на малых расстояниях является следствием принципа Паули. В идеальном ферми-газе  $g(r)$  равна нулю для частиц с одной и той же проекцией спина и значениями цветовой переменной, в то время как для частиц с различными значениями цветовой переменной и/или противоположными спинами парная корреляционная функция равна 1 в пределе  $r \rightarrow 0$ . Как следствие, усреднение парной корреляционной функции по спину и цвету дает для нее значение меньше 1 при  $r = 0$ . Такое поведение

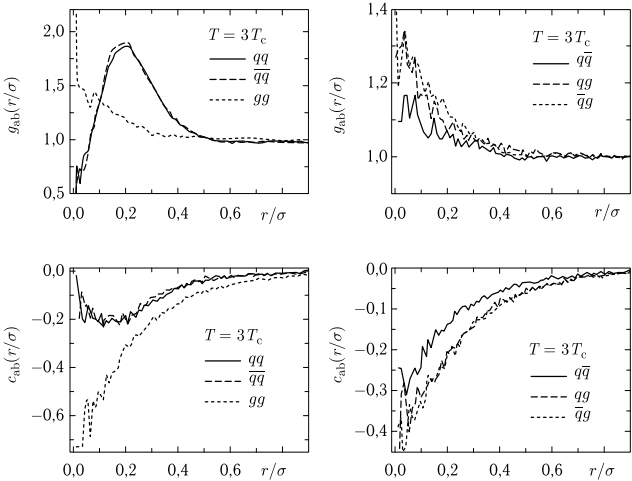


Рис. 5.30. Парные корреляционные функции (верхний ряд) и цветные парные корреляционные функции (нижний ряд) одинаковых (левый столбец) и различных (правый столбец) квазичастиц при температуре  $T = 3T_c$

на малых расстояниях также наблюдалось в неидеальной плотной астрофизической электрон-ионной плазме и неидеальной электрон-дырочной плазме в полупроводниках [117, 118]. Малая вероятность найти пару кварков (или антикварков) на малых расстояниях приводит к увеличению числа пар этих частиц на промежуточных расстояниях, что приводит к появлению максимума на соответствующей парной корреляционной функции.

Все парные корреляционные функции квазичастиц различных типов (верхний правый угол рис. 5.30) обнаруживают сходное поведение. На малых расстояниях,  $r < 0,3\sigma$ , наблюдается быстрый рост, аналогично поведению глюон-глюонной парной корреляционной функции. Этот рост парной корреляционной функции на малых расстояниях является признаком эффективного парного притяжения кварков и антикварков, а также кварков (антикварков) и глюонов.

Таким образом, цветовые векторы этих пар квазичастиц являются антипараллельными. Это утверждение можно проверить, рассчитав цветные парные корреляционные функции, определяемые как

$$c_{ab}(R_1 - R_2) = \frac{1}{ZN_q!N_{\bar{q}}!N_g!} \times \sum_{\sigma} \int drdQ \langle Q_1^a | Q_2^a \rangle \delta(R_1 - r_1^a) \delta(R_2 - r_2^b) \rho(r, Q, \sigma, \beta).$$

Цветные парные корреляционные функции показаны в нижнем ряду рис. 5.30. Все они принимают отрицательные значения на малых расстояниях, что говорит об анти-параллельной ориентации цветных векторов у пар квазичастиц. Минимум  $c_{qq}$  при  $r = 0,2\sigma$  соответствует максимуму  $g_{qq}$ . Глубокий минимум на глюонной цветной корреляционной функции на малых расстояниях является следствием статистики Бозе и соответствует максимуму на  $g_{qq}$ . Таким образом, при  $T/T_c = 3$  наблюдаются признаки пространственного упорядочивания, например, максимум на корреляционной функции кварк-кварк при  $r = (0,1 - 0,2)\sigma$ , который может быть связан с появлением жидкостно-подобного поведения КПП. Энергия КПП понижается из-за уменьшения цветной кулоновской энергии взаимодействия через спонтанное «антиферромагнитное» упорядочивание цветных векторов. Это приводит к кластеризации кварков, антикварков и глюонов.

На рисунке 5.31 представлены парные корреляционные функции одинаковых частиц для двух температур  $T = 1,1T_c$  и  $T = 2T_c$  (верхний и средний ряд). Вклад в корреляционные функции дают как связанные, так и «свободные» состояния квазичастиц. Однако необходимо отметить, что нельзя ввести строгий критерий разделения состояний на связанные и свободные из-за взаимного перекрытия облаков квазичастиц и сильного влияния окружающей плазмы. Тем не менее, грубая оценка доли связанных состояний может быть получена из следующих соображений. Произведение  $r^2 g_{ab}(r)$  характеризует вероятность найти пару квазичастиц на расстоянии  $r$  друг от друга. С другой стороны, соответствующая квантово-механическая вероятность есть произведение  $r^2$  и двухчастичной слэтеровской суммы:

$$\sum_{ab} = 8\pi^{3/2} \lambda_{ab}^3 \sum_a |\Psi_a|^2 \exp(-\beta E_a) = \Sigma_{ab}^d + \Sigma_{ab}^c,$$

где  $E_a$  и  $\Psi_a$  — энергия (за вычетом энергии центра масс) и волновая функция пары квазичастиц, соответственно.  $\Sigma_{ab}$  определяет диагональную часть соответствующей матрицы плотности. Суммирование в ней производится по всем возможным состояниям  $f$  как дискретного ( $\Sigma_{ab}^d$ ), так и непрерывного ( $\Sigma_{ab}^c$ ) спектра.

При температурах ниже энергии связи и расстояниях меньше или порядка радиуса взаимодействия, главный вклад в слэтеровскую сумму дают связанные состояния. В электромагнитной плазме произведение  $r^2 \Sigma_{ab}^d$  имеет резкий максимум на расстояниях порядка радиуса Бора. Сходным образом, при низких температурах  $r^2 g_{q\bar{q}}$  образует явно выраженный максимум около  $r = 0,2$  Ферми, который можно интерпретировать как размер связанной пары  $q\bar{q}$ .

Таким образом, расчеты подтверждают существование связанных состояний тяжелых кварков и глюонов, предложенных в работе [119, 120] при промежуточных температурах около  $T_c$ . С ростом температуры эти связанные состояния распадаются намного быстрее, чем предполагалось ранее [119, 120], что согласуется с анализом работы [121]. При температуре  $T = 2T_c$  связанные состояния полностью исчезают, и  $r^2 g_{ab}$  ведет себя аналогично  $r^2 \Sigma_{ab}^c$ .

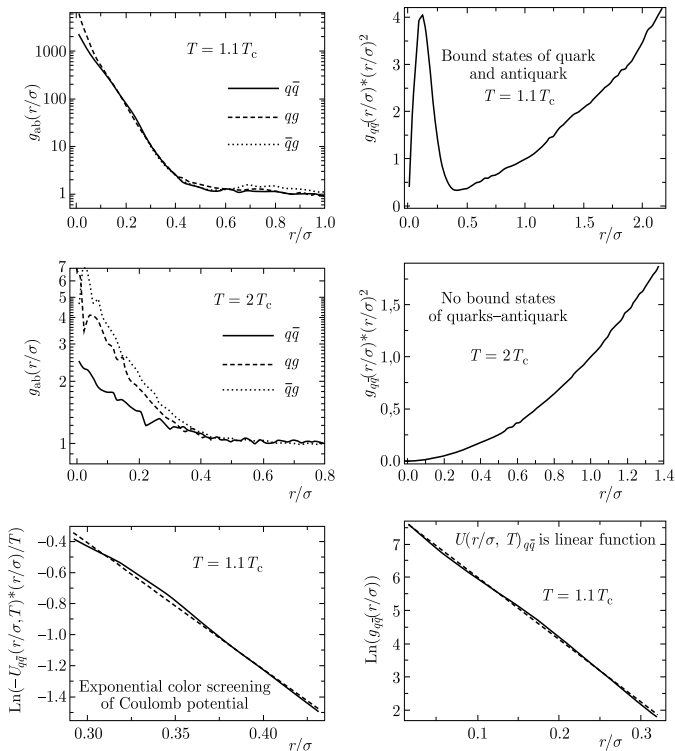


Рис. 5.31. Верхний и средний ряды: парные корреляционные функции при двух различных температурах  $T$  (слева) и корреляционные функции кварк-антикварк, умноженные на квадрат расстояния (справа). Нижний ряд: потенциал средней силы на малых расстояниях для  $T = 1,1T_c$  (справа) и больших расстояниях (слева)

На рис. 5.31 также представлены потенциал средней силы, определяемый как логарифм соответствующей парной корреляционной функции,  $U_{ab}(r, T) = -T \ln g_{ab}(r, T)$ , в зависимости от расстояния. Такое определение согласуется с вириальным разложением  $g_{ab}(r, T)$  в пределе малой плотности. Вблизи фазового перехода в КПП (при температуре порядка  $T_c$ ) потенциал средней силы (нижний правый угол) является линейной функцией на расстояниях меньших радиуса взаимодействия связанного состояния. Это

означает, что сила взаимодействия квазичастиц не зависит от расстояния. На больших расстояниях потенциал средней силы (нижний левый угол) может быть с высокой точностью аппроксимирован экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы).

### Список литературы

1. *Hansen J. P.* Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-Component Plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 6. — P. 3096.
2. *Pollock E. L., Hansen J. P.* Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One-Component Plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 6. — P. 3110.
3. *Hansen J. P., McDonald I. R.* Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma // *Phys. Rev. A.* — 1981. — V. 23, No. 4. — P. 2041.
4. *Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С.* Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. — М.: Наука, 1977.
5. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. — М.: Наука, 1981.
6. Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндера. — М.: Мир, 1982.
7. Quantum Color Dynamic Simulations of the Strongly Coupled Quark-Gluon Plasma / *Filinov V. S., Bonitz M., Ivanov Y. B. et al.* // *Contrib. Plasma Phys.* — 2011. — No. 4. — P. 322.
8. *Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д.* Теория связанных состояний и поляризационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир, 1979.
9. *Ларкин А. И.* // *ЖЭТФ.* — 1960. — Т. 38. — С. 1896.
10. *Бушман А., Фортвов В.* Модели уравнения состояния вещества // *УФН.* — 1983. — Т. 140, No. 2. — С. 177.
11. *Ceperley D.* The Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems / Ed. by K. Binder, G. Cicotti. — SIF: Bologna, 1996.
12. Quantum Dynamics of Condensed Phase Simulation / Ed. by B. J. Berne, G. Cicotti, D. F. Coker. — Singapore: World Scientific, 1998.
13. *Филинов В. С., Фортвов В. Е., Бонитц М., Левашов П. Р.* // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — Т. 74, № 7. — С. 422.
14. Thermodynamics of Hydrogen and Hydrogen-Helium Plasmas: Path Integral Monte Carlo Calculations and Chemical Picture / *Filinov V. S., Levashov P. R., Bonitz M., Fortov V. E.* // *Contrib. Plasma Phys.* — 2005. — V. 45, No. 3-4. — P. 258.
15. *Kelbg G.* // *Ann. Physik.* — 1963. — V. 12. — P. 219.
16. *Militzer B., Ceperley D. M.* Path integral Monte Carlo simulation of the low-density hydrogen plasma // *Phys. Rev. E.* — 2001. — V. 63, No. 6. — P. 066404.
17. *Xu H., Hansen J.-P.* Density-functional theory of pair correlations in metallic hydrogen // *Phys. Rev. E.* — 1998. — V. 57, No. 1. — P. 211.
18. *Weir S. T., Mitchell A. C., Nellis W. J.* Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 76, No. 11. — P. 1860.
19. *Ternovoi V. Y., Filimonov A. S., Fortov V. E. et al.* // *Physica B.* — 1999. — V. 265. — P. 6.
20. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization // *Phys. Rev. A.* — 1992. — V. 46, No. 4. — P. 2084.

21. *Saumon D., Chabrier G., Van Horn H. M.* // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 1995. — V. 99. — P. 713.
22. *Терновой В. Я., Квитов С. В., Пяллинг А. А. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* — 2004. — Т. 79, № 1. — С. 8.
23. *Filinov V. S., Levashov P. R., Bonitz M. et al.* // *AIP Conference Proceedings.* — New York: Melville, 2004. — V. 731. — P. 239.
24. Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas / *Filinov V. S., Bonitz M., Levashov P. R. et al.* // *J. Phys. A.: Math. Gen.* — 2003. — V. 36. — P. 6069.
25. *Schlanges M., Bonitz M., Tschtttschjan A.* Plasma phase transition in fluid hydrogen-helium mixtures // *Contrib. Plasma Phys.* — 1995. — V. 35. — P. 109.
26. *Ternovoi V. Y., Filimonov A. S., Fortov V. E. et al.* // *Physica B.* — 1999. — V. 265. — P. 6.
27. *Weir S. T., Mitchell A. C., Nellis W. J.* Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 76, No. 11. — P. 1860.
28. *Ternovoi V. Y., Filimonov A. S., Pyalling A. A. et al.* // *Shock Compression of Condensed Matter* / Ed. by M. D. Furnish, N. N. Thardhani, Y. Horie. — New York: Melville, 2001. — AIP Conference Proceedings. — P. 107.
29. *Эбелинг В., Крефт В., Кремн Д.* Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир, 1979.
30. *Ebeling W., Förster A., Fortov V. E., Gryaznov V. K., Polishchuk A. Ya.* Thermophysical Properties of Hot Dense Plasma. — Leipzig: B. G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart, 1991.
31. *Filinov V. S., Levashov P. R., Bonitz M., Fortov V. E.* // *Plasma Phys. Rep.* — 2005. — V. 31, No. 8. — P. 700.
32. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
33. *Militzer B., Ceperley D. M.* Path Integral Monte Carlo Calculation of the Deuterium Hugoniot // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 85, No. 9. — P. 1890.
34. Absolute Equation of State Measurements on Shocked Liquid Deuterium up to 200 GPa (2 Mbar) / *Da Silva L. B., Celliers P., Collins G. W. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — V. 78, No. 3. — P. 483.
35. Measurements of the Equation of State of Deuterium at the Fluid Insulator-Metal Transition / *Collins G. W., Da Silva L. B., Celliers P. et al.* // *Science.* — 1998. — V. 281, No. 5380. — P. 1178.
36. Use of a Wave Reverberation Technique to Infer the Density Compression of Shocked Liquid Deuterium to 75 GPa / *Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — V. 90, No. 3. — P. 035505.
37. *Белов С. И., Борисков Г. В. и др.* Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях / Под ред. А. Л. Михайлова. — Саров: ВНИИЭФ, 2003.
38. Equation-of-state data for molecular hydrogen and deuterium at shock pressures in the range 2–76 GPa (20–760 kbar)[sup a)] / *Nellis W. J., Mitchell A. C., van Thiel M. et al.* // *J. Chem. Phys.* — 1983. — V. 79, No. 3. — P. 1480.
39. SESAME: The Los Alamos National Laboratory Equation of State Database. LA-UR-92-3407. — Los Alamos, 1992.
40. *Ross M.* Linear-mixing model for shock-compressed liquid deuterium // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Jul. — V. 58. — P. 669.
41. *Desjarlais M. P.* Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing // *Phys. Rev. B.* — 2003. — V. 68, No. 6. — P. 064204.

42. Bonev S. A., Militzer B., Galli G. Ab initio simulations of dense liquid deuterium: Comparison with gas-gun shock-wave experiments // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69, No. 1. — P. 014101.
43. Wave packet molecular dynamics simulations of warm dense hydrogen / Knaup M., Reinhard P., Töpferr C., Zwirnagel G. // J. Phys. A.: Math. Gen. — 2003. — V. 36. — P. 6165.
44. Reaction ensemble Monte Carlo technique and hypernetted chain approximation study of dense hydrogen / Bezukroniy V., Schlanges M., Kremp D., Kraeft W. D. // Phys. Rev. E. — 2004. — V. 69, No. 6. — P. 061204.
45. Nellis W. J. Shock Compression of Deuterium near 100 GPa Pressures // Phys. Rev. Lett. — 2002. — V. 89, No. 16. — P. 165502.
46. Filinov V. S. // J. Phys. A. — 2001. — V. 34. — P. 1665.
47. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas / Filinov V. S., Fehske H., Bonitz M. et al. // Phys. Rev. E. — 2007. — V. 75, No. 3. — P. 036401.
48. Wachter P., Bucher B., Malar J. Possibility of a superfluid phase in a Bose condensed excitonic state // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69, No. 9. — P. 094502.
49. Wigner E. On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. — 1934. — V. 46, No. 11. — P. 1002.
50. Grimes C. C., Adams G. Evidence for a Liquid-to-Crystal Phase Transition in a Classical, Two-Dimensional Sheet of Electrons // Phys. Rev. Lett. — 1979. — V. 42, No. 12. — P. 795.
51. Observation of a Magnetically Induced Wigner Solid / E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glattli et al. // Phys. Rev. Lett. — 1988. — V. 60, No. 26. — P. 2765.
52. Filinov A. V., Bonitz M., Lozovik Y. E. Wigner Crystallization in Mesoscopic 2D Electron Systems // Phys. Rev. Lett. — 2001. — V. 86, No. 17. — P. 3851.
53. Crystallization of charge holes in the spin ladder of  $\text{Sr}_14\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  / Abbamonte P., G. Blumberg, Ruydi A. et al. // Nature. — 2004. — V. 431. — P. 1078.
54. Atomic-Ion Coulomb Clusters in an Ion Trap / Wineland D. J., Bergquist J. C., Itano W. M. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1987. — V. 59, No. 26. — P. 2935.
55. Bragg diffraction from crystallized ion plasmas / Itano W. M., Bollinger J. J., Tan J. N. et al. // Science. — 1998. — V. 279. — P. 686.
56. Schatz T., Schramm U., Habs D. Crystalline ion beams // Nature. — 2001. — V. 412. — P. 717.
57. Harmonic lattice theory of coulomb solids and comparison with Monte Carlo simulations / DeWitt H., Slattery W., Baiko D., Yakovlev D. // Contrib. Plasma Phys. — 2001. — V. 41, No. 2-3. — P. 251.
58. Ceperley D. M., Alder B. J. Ground state of the electron gas by a stochastic method // Phys. Rev. Lett. — 1980. — V. 45. — P. 566.
59. Tanatar B., Ceperley D. M. Ground state of the two-dimensional electron gas // Phys. Rev. B. — 1989. — V. 39. — P. 5005.
60. Segretain L. // Astron. Astrophys. — 1996. — V. 310. — P. 485.
61. Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma / Thomas H., Morfill G. E., Demmel V. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — V. 73, No. 5. — P. 652.
62. Hayashi Y., Tachibana K. // Jpn. J. Appl. Phys. — 1994. — V. 33. — P. L804.
63. Dust Coulomb Balls: Three-Dimensional Plasma Crystals / Arp O., Block D., Piel A., Melzer A. // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 93, No. 16. — P. 165004.
64. Ludwig P., Kosse S., Bonitz M. Structure of spherical three-dimensional Coulomb crystals // Phys. Rev. E. — 2005. — V. 71, No. 4. — P. 046403.

65. *Pohl T., Pattard T., Rost J. M.* Coulomb Crystallization in Expanding Laser-Cooled Neutral Plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — V. 92, No. 15. — P. 155003.
66. *Killian T.* Plasmas put in order // *Nature.* — 2004. — V. 429. — P. 815.
67. Theory and simulation of strong correlations in quantum Coulomb systems / *Bonitz M., Semkat D., Filinov A. et al.* // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2003. — V. 36. — P. 5921.
68. Электронно-дырочные капли в полупроводниках / Под ред. К. Д. Джеффриса и Л. В. Келдыша. — Москва: Наука, 1988.
69. *Thomas G. A., Rice T. M., Hensel J. C.* Liquid-Gas Phase Diagram of an Electron-Hole Fluid // *Phys. Rev. Lett.* — 1974. — V. 33, No. 4. — P. 219.
70. *Car R., Parrinello M.* Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // *Phys. Rev. Lett.* — 1985. — V. 55, No. 22. — P. 2471.
71. *Allen M., Tildesley D.* Computer simulation of liquids. — New York, Oxford: Oxford University Press, 1989.
72. *Feynman R. P.* Forces in Molecules // *Phys. Rev.* — 1939. — V. 56, No. 4. — P. 340.
73. *Bendt P., Zunger A.* New approach for solving the density-functional self-consistent-field problem // *Phys. Rev. B.* — 1982. — V. 26, No. 6. — P. 3114.
74. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients / *Payne M. C., Teter M. P., Allan D. C. et al.* // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — V. 64, No. 4. — P. 1045.
75. *Böhler R., Ross M.* // *Earth Planet. Sci. Lett.* — 1997. — V. 153. — P. 223.
76. *Hänström A., Lazor P.* // *J. Alloys Compd.* — 2000. — V. 305. — P. 209.
77. *Shaner J. W., Brown J. M., McQueen R. G.* High Pressure in Science and Technology. — Amsterdam: North Holland, 1984.
78. *Holst B., Nettlemann N., Redmer R.* Equation of State for Dense Hydrogen and Plasma Phase Transition // *Contrib. Plasma Phys.* — 2007. — V. 47, No. 4–5. — P. 368.
79. *Saumon D., Chabrier G., van Horn H. M.* // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 1995. — V. 99. — P. 713.
80. *Raty J.-Y., Schwegler E., Bonev S. A.* Electronic and structural transitions in dense liquid sodium // *Nature.* — 2007. — V. 449. — P. 448.
81. Melting curve of aluminum up to 300 GPa obtained through ab initio molecular dynamics simulations / *Bouchet J., Bottin F., Jomard G., Zerah G.* // *Phys. Rev. B.* — 2009. — V. 80, No. 9. — P. 094102.
82. Melting of Fe and  $Fe_{0.9375}Si_{0.0625}$  at Earth's core pressures studied using ab initio molecular dynamics / *Belonoshko A. B., Rosengren A., Burakovsky L. et al.* // *Phys. Rev. B.* — 2009. — V. 79, No. 22. — P. 220102.
83. *Holst B., Redmer R., Desjarlais M. P.* Thermophysical properties of warm dense hydrogen using quantum molecular dynamics simulations // *Phys. Rev. B.* — 2008. — V. 77, No. 18. — P. 184201.
84. *Desjarlais M. P.* Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing // *Phys. Rev. B.* — 2003. — V. 68, No. 6. — P. 064204.
85. *Bonev S. A., Militzer B., Galli G.* Ab initio simulations of dense liquid deuterium: Comparison with gas-gun shock-wave experiments // *Phys. Rev. B.* — 2004. — V. 69, No. 1. — P. 014101.
86. *Militzer B.* First Principles Calculations of Shock Compressed Fluid Helium // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 97, No. 17. — P. 175501.

87. Quantum Molecular Dynamics Simulations for the Nonmetal-to-Metal Transition in Fluid Helium / *Kietzmann A., Holst B., Redmer R. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — V. 98, No. 19. — P. 190602.
88. *Knudson M. D., Desjarlais M. P.* Shock Compression of Quartz to 1.6 TPa: Redefining a Pressure Standard // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — V. 103, No. 22. — P. 225501.
89. *Knudson M. D., Desjarlais M. P., Dolan D. H.* Shock-wave exploration of the high-pressure phases of carbon // *Science.* — 2008. — V. 322. — P. 1822.
90. *Mattsson T. R., Desjarlais M. P.* Phase Diagram and Electrical Conductivity of High Energy-Density Water from Density Functional Theory // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 97, No. 1. — P. 017801.
91. Combined Pressure and Electrical-Resistivity Measurements of Warm Dense Aluminum and Titanium Plasmas / *Renaudin P., Blancard C., Faussurier G., Noiret P.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — V. 88, No. 21. — P. 215001.
92. Aluminum Equation-of-State Data in the Warm Dense Matter Regime / *Renaudin P., Blancard C., Clérouin J. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — V. 91, No. 7. — P. 075002.
93. Electronic structure and equation of state data of warm dense gold / *Renaudin P., Recoules V., Noiret P., Clérouin J.* // *Phys. Rev. E.* — 2006. — V. 73, No. 5. — P. 056403.
94. *Shuryak E.* Physics of strongly coupled quark-gluon plasma // *Progress in Particle and Nuclear Physics.* — 2009. — V. 62, No. 1. — P. 48.
95. *Bazavov A. et al.* arXiv:0903.4379 [hep-lat].
96. *Fodor Z., Katz S. D.* arXiv:0908.3341 [hep-ph].
97. Equation of state at finite temperature and chemical potential, lattice QCD results / *Csikor F., Egri G. I., Fodor Z. et al.* // *JHEP.* — 2004. — V. 2004, No. 05. — P. 046.
98. *Litim D. F., Manuel C.* Mean Field Dynamics in Non-Abelian Plasmas from Classical Transport Theory // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — V. 82. — P. 4981.
99. *Litim D. F., Manuel C.* Effective transport equations for non-abelian plasmas // *Nucl. Phys. B.* — 1999. — V. 562, No. 1-2. — P. 237.
100. *Litim D. F., Manuel C.* Fluctuations from dissipation in a hot non-abelian plasma // *Phys. Rev. D.* — 2000. — V. 61. — P. 125004.
101. *Litim D. F., Manuel C.* Semi-classical transport theory for non-Abelian plasmas // *Phys. Rep.* — 2002. — V. 364, No. 6. — P. 451.
102. Statistical mechanics of colored objects / *M. Hofmann, Bleicher M., Scherer S. et al.* // *Phys. Lett. B.* — 2000. — V. 478, No. 1-3. — P. 161.
103. *Gelman B. A., Shuryak E. V., Zahed I.* Classical strongly coupled quark-gluon plasma. II. Screening and equation of state // *Phys. Rev. C.* — 2006. — V. 74, No. 4. — P. 044909.
104. *Cho S., Zahed I.* Classical strongly coupled quark-gluon plasma. iii. the free energy // *Phys. Rev. C.* — 2009. — V. 79. — P. 044911.
105. *Cho S., Zahed I.* Classical strongly coupled quark-gluon plasma. IV. Thermodynamics // *Phys. Rev. C.* — 2009. — V. 80. — P. 014906.
106. *Dusling K., Zahed I.* // *Nucl. Phys. A.* — 2010. — V. 833. — P. 172.
107. *Thoma M.* // *IEEE Trans. Plasma Science.* — 2004. — V. 32. — P. 738.
108. arXiv:1006.3390v1 [nucl-th] / *Filinov S., Ivanov Y., Bonitz M. et al.* — 2010.
109. *Petreczky P., Karsch F., Laermann E. et al.* // *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* — 2002. — V. 106. — P. 513.

110. *Liao J., Shuryak E. V.* What do lattice baryonic susceptibilities tell us about quarks, diquarks, and baryons at  $T > T_c$ ? // *Phys. Rev. D.* — 2006. — V. 73, No. 1. — P. 014509.
111. *Wong S.* Field and particle equations for the classical Yang-Mills field and particles with isotopic spin // *Nuovo Cimento A.* — 1970. — V. 65. — P. 689.
112. *Richardson J. L.* The heavy quark potential and the  $\Upsilon$ ,  $J/\psi$  systems // *Phys. Lett. B.* — 1979. — V. 82. — P. 272.
113. *Feynman R. P., Hibbs A. R.* Quantum Mechanics and Path Integrals. — McGraw-Hill, N.Y., Moscow: McGraw-Hill, 1965.
114. Massive quasiparticle model of the SU(3) gluon plasma / *Peshier A., Kämpfer B., Pavlenko O. P., Soff G.* // *Phys. Rev. D.* — 1996. — V. 54, No. 3. — P. 2399.
115. *Ivanov Y. B., Skokov V. V., Toneev V. D.* Equation of state of deconfined matter within a dynamical quasiparticle description // *Phys. Rev. D.* — 2005. — V. 71, No. 1. — P. 014005.
116. *Karsch F., Kitazawa M.* arXiv:0906.3941v1 [hep-lat].
117. Hole crystallization in semiconductors / *Bonitz M., Filinov V. S., Fortov V. E. et al.* // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2006. — V. 39. — P. 4717.
118. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas / *Filinov V. S., Fehske H., Bonitz M. et al.* // *Phys. Rev. E.* — 2007. — V. 75, No. 3. — P. 036401.
119. *Shuryak E. V., Zahed I.* Rethinking the properties of the quark-gluon plasma at  $T_c < T < 4T_c$  // *Phys. Rev. C.* — 2004. — V. 70, No. 2. — P. 021901.
120. *Brown G. E., Gelman B. A., Rho M.* arXiv:nucl-th/0505037.
121. *Koch V., Majumder A., Randrup J.* Baryon-Strangeness Correlations: A Diagnostic of Strongly Interacting Matter // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — V. 95, No. 18. — P. 182301.

## Глава 6

### СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЕЩЕСТВА

В предыдущих главах мы видели, что описание термодинамических, структурных и транспортных свойств реальных веществ требует корректного квантовомеханического расчета волновых функций и энергетических спектров многоэлектронных систем, что связано в общем случае с громадными вычислительными трудностями решения квантовомеханической задачи многих тел. Это делает необходимым введение упрощающих предположений, составляющих основу современных моделей конденсированного состояния, ряд которых мы рассмотрим в двух последующих главах. Но сначала немного истории, в изложении которой мы будем следовать прекрасной работе [1].

#### 6.1. О квантовомеханических расчетах многоэлектронных структур

Квантовомеханическое описание термодинамических, структурных и электронных свойств атомов, молекул твердых тел, жидкостей, имеет давнюю историю [1–4].

Связь между положительным зарядом ядра, атомным номером и положением атома в Периодической системе была открыта 1913 году. Количественное обоснование этой связи было дано методами квантовой механики.

В 1926 г. Гейзенберг предложил матричную механику, а Шредингер — основное нерелятивистское волновое уравнение, описывающее движение ядер и электронов в молекулах:

$$H\Psi = E\Psi, \quad (6.1)$$

которое представляет собой дифференциальное уравнение на собственные значения для энергии  $E$  и волновой функции  $\Psi$  данного состояния. Здесь  $H$  — оператор Гамильтона, а  $\Psi$  зависит от декартовых и спиновых координат частиц. Единственное дополнительное ограничение состоит в том, что волновая функция  $\Psi$  должна обладать определенной симметрией относительно перестановок частиц (быть антисимметричной для фермионов, например электронов, и симметричной для бозонов). Релятивистское обобщение этого уравнения было вскоре предложено Дираком.

Уравнение Шредингера легко решается для атома водорода и, как выяснилось, получаемые при этом результаты идентичны более ранним результатам Бора. Учет релятивистских поправок при использовании уравнения Дирака приводит к практически полному согласию с экспериментальными спектроскопическими данными. Однако для любой другой системы найти точное решение не удавалось, что и вызвало широко известное замечание Дирака 1929 года: «Таким образом, фундаментальные законы, необходимые

для математического описания значительной части физики и всей химии, полностью известны, и проблема заключается только в том, что применение этих законов приводит к уравнениям, слишком сложным, чтобы их можно было решить».

Для большинства ученых-физиков это означало, что фундаментальные открытия в химии закончились, но осталась грандиозная математическая задача их реализации. Ретроспективно это утверждение, принимая во внимание его окончательный характер, выглядит чрезвычайно смелым. Тогда, в 1929 г., был всего один — предварительный и приближенный — квантовомеханический расчет молекулы водорода, выполненный Гайтлером и Лондоном, причем полученное в нем значение энергии связи составляло только около 70 % от экспериментальной величины. Но в 1930-е годы большинство физиков перешло к исследованиям внутренней структуры ядра. Формально такой взгляд на вещи был, по-видимому, оправданным, поскольку никаких серьезных недостатков в полной теории Шредингера–Дирака до сих пор не обнаружено.

В это время основные усилия относились к расчетам химических структур многоэлектронных атомов [1]. Следуя работе [1], мы начнем изложение расчетов изолированных моделей, составляющих предмет квантовой химии, а затем перейдем к рассмотрению конденсированного состояния.

Если попытки получить точное решение безнадежны, то каким образом можно разработать такие приближенные математические процедуры, которые (а) позволят качественно интерпретировать химические явления и (б) будут обладать предсказательной силой?

В 1930-е годы большинство работ были качественными, в них считалось, что электроны движутся по независимым молекулярным орбиталям. Основы теории орбиталей для многоэлектронных систем были заложены Хартри, Фоком и Слэтером. Пусть  $2n$  электронов в молекуле с замкнутыми электронными оболочками распределены по  $n$  орбиталям  $\psi_i$ , ( $i = 1, \dots, n$ ), тогда соответствующая многоэлектронная волновая функция записывается как

$$\Psi = (n!)^{-1/2} \det[(\psi_1\alpha)(\psi_1\beta)(\psi_2\alpha) \dots]. \quad (6.2)$$

Здесь  $\psi_i$  ортонормированы, а  $\alpha$  и  $\beta$  — спиновые функции. Эту одноконфигурационную волновую функцию обычно называют слэтеровским детерминантом.

Если проварьировать молекулярные орбитали  $\psi_i$  так, чтобы минимизировать энергию, вычисляемую как среднее значение полного гамильтониана  $H$ ,

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (6.3)$$

то энергия  $E$  оказывается полностью определенной и, согласно вариационному принципу, она является верхней границей для точной шредингеровской энергии, следующей из общего волнового уравнения (6.1). Такая процедура приводит к системе связанных дифференциальных уравнений для  $\psi_i$ , впервые выведенных Фоком. Этот метод называется приближением Хартри–Фока; первые работы по его применению (к атомам) были выполнены Хартри.

Большой успех был достигнут в 1951 г., когда в Чикаго были предложены уравнения Рутана [5]. Рутан рассмотрел молекулярные орбитали в виде

линейных комбинаций некоторого набора заданных трехмерных одноэлектронных функций  $\chi_\mu$  ( $\mu = 1, 2, \dots, N$ , где  $N > n$ ). Таким образом,

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^N c_{\mu i} \chi_\mu. \quad (6.4)$$

Затем полная энергия (6.3) варьируется по отношению к коэффициентам  $c_{\mu i}$ . Это приводит к системе алгебраических уравнений, которую можно записать в матричном виде (здесь всюду используются вещественные функции и атомные единицы):

$$FC = SCE, \quad (6.5)$$

где

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda\sigma} P_{\lambda\sigma} \left[ (\mu\nu|\lambda\sigma) - \frac{(\mu\lambda|\nu\sigma)}{2} \right], \quad (6.6)$$

$$H_{\mu\nu} = \int \chi_\mu H \chi_\nu d\tau, \quad (6.7)$$

$$S_{\mu\nu} = \int \chi_\mu \chi_\nu d\tau, \quad (6.8)$$

$$E_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}, \quad (6.9)$$

$$P_{\mu\nu} = 2 \sum_i^n c_{\mu i} c_{\nu i}, \quad (6.10)$$

$$(\mu\nu|\lambda\sigma) = \iint \chi_\mu(1) \chi_\nu(1) \frac{1}{r_{12}} \chi_\lambda(2) \chi_\sigma(2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (6.11)$$

В этих и последующих уравнениях используются латинские индексы для молекулярных орбиталей  $\psi$  и греческие — для функций  $\chi$ , по которым проводится разложение. Здесь  $H$  — гамильтониан остова, описывающий движение одного электрона только лишь в поле ядер. Собственные значения  $\varepsilon_i$  представляют собой одноэлектронные фоковские энергии, причем  $n$  нижних собственных значений отвечают занятым молекулярным орбиталям с индексами  $1, 2, \dots, n$ .

Если заданные функции  $\chi_\mu$  однозначно определяются положениями ядер, то вышеприведенные нелинейные уравнения представляют собой законченную математическую модель. Их часто называют уравнениями самосоглазованного поля (ССП) — self-consistent field (SCF). В первых версиях метода молекулярных орбиталей в качестве  $\chi_\mu$  выбирались атомные орбитали составляющих молекулу атомов; этот метод известен как «метод линейной комбинации атомных орбиталей» (linear combination of atomic orbitals, LCAO), или LCAOSCF (в русской литературе — СПП МО ЛКАО). В общем случае набор функций  $\{\chi_\mu\}$  называется базисным набором. Обычно выбирают такие базисные функции, которые центрированы на ядрах и зависят только от атомного номера (положительного заряда) этих ядер.

Уравнения типа Рутана можно обобщить на случай таких электронных конфигураций, когда одни орбитали заполнены двумя электронами, а дру-

гие — одним. Другое обобщение заключается в том, что электроны со спинами  $\alpha$  и  $\beta$  относятся к разным молекулярным орбиталям  $\psi^\alpha$  и  $\psi^\beta$ ; такое приближение обычно называют спин-неограниченной конфигурацией. В этом случае возникает два набора коэффициентов  $c_{\mu i}^\alpha$  и  $c_{\mu i}^\beta$ . Соответствующее обобщение уравнений Рутана было опубликовано в 1954 г. [6]. Это приближение называется неограниченным (unrestricted) методом Хартри–Фока (НХФ), или UHF, а приближение, в котором допускается двукратное и однократное заполнение орбиталей, называется ограниченным методом Хартри–Фока для незамкнутых оболочек (ОХФ) — restricted open shell HF method (ROHF).

Введение разложения по базисному набору сыграло большую роль в развитии квантовой химии. Оно превратило математическую задачу численного решения системы связанных дифференциальных уравнений (как в атомных расчетах Хартри) в двойную проблему вычисления трех- или шестимерных интегралов (6.7), (6.8) и (6.11) и последующего решения системы алгебраических SCF-уравнений (6.5). Если бы эти интегралы вычислялись аналитически, то модель могла бы оказаться точной в том смысле, что можно было бы достичь хорошей арифметической точности даже в случае, когда основные приближения модели (использование одноконфигурационного детерминанта и конечного базиса) остаются неудовлетворительными.

В 1950-е годы вычисление этих интегралов считалось основным препятствием для продвижения вперед. Лучшим набором базисных функций в теории LCAOSCF казались атомные орбитали слэтеровского типа (ОСТ) — Slater-type orbitals (STO), которые имеют экспоненциальные радиальные части, аналогичные таковым у орбиталей атома водорода. При этом одно- и двухэлектронные интегралы (6.7), (6.8) и (6.11) в двухцентровом случае можно вычислить аналитически. Однако в трех- и четырехцентровом случае возникали огромные трудности. В то время это безвыходное положение было известно как «кошмар с интегралами» [1].

Было предложено два пути преодоления описанных трудностей с интегрированием. Один из них заключается в том, чтобы ввести приближения для наиболее сложных интегралов, а для остальных ввести некие параметры и определить значения этих параметров эмпирически — путем подгонки под экспериментальные данные. Такие методы стали называть полуэмпирическими. Что касается альтернативного подхода, без введения приближений или эмпирической параметризации, его область применения в то время неизбежно ограничивалась лишь очень небольшими молекулами; такой подход получил название неэмпирического, или первопринципного (ab initio). Наиболее широко использовались полуэмпирические методы, основанные на приближении нулевого дифференциального перекрывания (НДП) — zero differential overlap (ZDO), когда в большинстве интегралов пренебрегают произведениями различных атомных орбиталей  $\chi_\mu \chi_\nu$ . Это приближение в применении к  $\pi$ -электронам органических молекул с сопряженными связями стали называть теорией Паризера–Парра–Попла, ППП (PPP) [7–10]. Позднее, в 1964–1966 гг., были получены обобщения этой теории, описывающие все валентные электроны — методы полного и частичного пренебрежения дифференциальном перекрывании (ППДП, ЧПДП) — complete and intermediate

neglect of differential overlap (CNDO, INDO) [11, 12], а затем метод PPP был сведен к более эмпирическому варианту группой Дьюара (M. J. S. Dewar). Методы CNDO/INDO являлись настоящими химическими моделями в том смысле, что их можно было использовать для изучения многих молекул, для варьирования структуры с целью определения равновесной геометрии и для построения потенциальных поверхностей. Однако их возможности были ограничены погрешностями, которые возникали из-за многочисленных аппроксимаций интегралов и наличия большого количества эмпирических параметров.

Предложение использовать функции типа гауссовых в качестве базисных стало поистине большим достижением для «первопринципного» сообщества. В 1950 г. С. Ф. Бойс (S. F. Boys), показал [13], что если радиальные части имеют вид  $P(x, y, z) \exp(-r^2)$ , где  $P(x, y, z)$  — любой полином декартовых координат  $x, y$  и  $z$ , то все интегралы в теории SCF можно взять аналитически. Это предложение в его первоначальном виде, очевидно, не представляло большого интереса, так как отдельные гауссовы функции являются плохим приближением к атомным орбиталам. Однако было ясно, что в перспективе его можно улучшить, если использовать большее число таких базисных функций. В течение нескольких лет происходило соревнование между поборниками слэтеровских и гауссовых базисных функций.

Компьютеры стали применяться в квантовой механике также в 1950-е годы. В 1959 году существовало уже несколько групп, развивающих программы неэмпирических расчетов на основе как слэтеровских, так и гауссовых базисов. В начале 1960-х гг. были развиты другие программы общего назначения. Среди них следует отметить пакеты программ POLY ATOM и IBMOL на основе гауссовых функций, позволившие выполнить ряд оригинальных расчетов молекулярных орбиталей в базисе LCAO, или в минимальном базисе

Удалось создать новый алгоритм вычисления интегралов, который позволил повысить эффективность расчетов на базисных наборах из сгруппированных гауссовых функций более чем на два порядка величины [14].

Это составило основу программы для всеобщего доступа под названием GAUSSIAN70.

Модели, основанные на приближении Хартри–Фока, работают значительно лучше, если включить в базис по одному набору несгруппированных d-функций на каждый тяжелый атом (т.е. кроме атомов водорода). Такой базис обозначается как 6-31G\* или 6-31G(d) [15, 16]. Если же добавить в базис еще и по одному набору несгруппированных p-функций на каждый атом водорода, то такой базис обозначается как 6-31G\*\* или 6-31G(d, p). Эти дополнительные базисные функции называются поляризационными функциями. Полная модель с базисом 6-31G\* обозначается, соответственно, как HF/6-31G\*. Другие важные примеры расширения базисного набора: введение поляризационных функций с еще более высокими угловыми моментами (например, базис 6-31G(2df, p), который содержит два набора d-функций и набор f-функций на каждый тяжелый атом, а также один набор p-функций на каждый атом водорода); использование диффузных функций, которые особенно полезны для анионов и возбужденных электронных состояний. В этом случае базис обозначается дополнительным знаком «+», например, 6-31G+(d).

Существенный скрытый дефект метода Хартри–Фока состоит в пренебрежении электронной корреляцией при движении электронов с антипараллельными спинами ( $\alpha\beta$ -корреляция). Уже в самом начале становления квантовой химии теоретики понимали, что при пренебрежении корреляцией энергия диссоциации (т. е. разрыва) связей получается сильно заниженной. Качественно это можно понять, рассматривая процесс полной гемолитической диссоциации связи, когда один электрон остается на одном центре, а второй — на другом. Если движение этих двух электронов нескоррелировано, то существует некоторая отличная от нуля вероятность, что они оба останутся на одном и том же центре.

При использовании однодетерминантных волновых функций неявно подразумевается пренебрежение электронной  $\alpha\beta$ -корреляцией; работа с уточненными волновыми функциями неизбежно означает использование нескольких детерминантов. В наиболее практических подходах, учитывающих корреляцию, сначала строится детерминант Хартри–Фока, а затем — его линейные комбинации с другими детерминантами. Особенно удобно строить дополнительные детерминанты из незаполненных, или виртуальных молекулярных орбиталей, которые являются собственными функциями оператора Фока, соответствующими более высоким энергиям. Если используется некоторый конечный базис для задачи с  $2n$  электронами и  $N$  декартовыми базисными функциями, то получается  $N - n$  виртуальных орбиталей, которые могут быть заняты электронами со спином  $\alpha$  или  $\beta$ .

Здесь удобно несколько изменить обозначения и перейти к другим базисным функциям — спин-орбиталям, которые представляют собой произведения декартовых базисных функций на спиновые функции  $\alpha$  или  $\beta$ . Теперь  $N$  — это размер базиса спин-орбиталей (который в два раза больше числа прежних базисных функций), а  $n$  — полное число электронов. Такие обозначения позволяют описывать как спин-ограниченный, так и спин-неограниченный случай. Будем использовать индексы  $i, j, k, \dots$  для заполненных спин-орбиталей, а  $a, b, c, \dots$  — для виртуальных, в этом случае однодетерминантные функции, построенные на фоковских орбиталях, можно подразделить на исходную (т. е. хартри-фоковскую)  $\Psi_0$ , однократно возбужденные  $\psi_i^a$ , двукратно возбужденные  $\Psi_{ij}^{ab}$  и т. д. Тогда полную многодетерминантную функцию можно записать в следующем виде:

$$\Psi = a_0 \Psi_0 + \sum_{ia} a_i^a \Psi_i^a + \sum_{ijab} a_{ij}^{ab} \Psi_{ij}^{ab} + \dots \quad (6.12)$$

Коэффициенты  $a$  можно определить вариационным методом, минимизируя вычисляемую энергию. Это метод конфигурационного взаимодействия (КВ) — configuration interaction (CI). Если добавлены только однократно возбужденные детерминанты, то понижения энергии не происходит, так как заполненные орбитали уже оптимизированы. В простейшей эффективной форме метода CI в формуле (6.12) учитываются только двукратно (double) возбужденные детерминанты. Этот метод обычно обозначают как CID. Если однократно возбужденные (single) определители также учтены, то это метод CISD. Описанные варианты метода конфигурационного взаимодействия были впервые

реализованы в виде итерационных схем примерно в 1970 г. и до сих пор часто используются в практических расчетах. Если в разложение включены все возможные возбуждения, что приводит к большому, но конечному базису (при использовании конечного базисного набора), то это метод полного конфигурационного взаимодействия, или FCI (full configuration interaction). Хотя в принципе желательно использовать процедуру FCI, обычно она требует слишком больших вычислительных затрат, за исключением случая очень малых систем.

При задании стандартного базиса модели CID и CISD являются хорошо определенными, тем не менее, они имеют некоторые серьезные недостатки. Это связано с размерной согласованностью. Если некоторый метод, например CID, применяется к двум полностью изолированным системам, то полученная в результате энергия не равна сумме энергий, полученных в результате применения того же метода к каждой системе в отдельности. Если метод CID применяется, скажем, к двум изолированным атомам гелия, то волновая функция не учитывает одновременного возбуждения пар в каждом из атомов, поскольку такое возбуждение является строго четырехкратным. Этот недостаток моделей CID и CISD, очевидно, должен приводить к неудовлетворительному описанию больших молекул и взаимодействующих систем.

Второй основной метод учета электронной корреляции состоит в использовании теории возмущений. Предположим, что мы определили возмущенный гамильтониан как

$$H(\lambda) = F_0 + \lambda\{H - F_0\}, \quad (6.13)$$

где  $F_0$  — гамильтониан Фока (для которого однодетерминантные в выражении (6.12) функции являются точными собственными функциями), тогда  $\Psi_0$  — волновая функция при  $\lambda = 0$ , а точная  $\Psi$  (FCI-функция) получается при  $\lambda = 1$ . Далее применяется следующая процедура: вычисляемую энергию разлагают по степеням  $\lambda$ :

$$E(\lambda) = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \dots, \quad (6.14)$$

полученный ряд обрезают на некотором слагаемом и затем полагают  $\lambda = 1$ . Этот метод теории возмущений был впервые предложен Меллером и Плессе [17]; для него часто используют обозначение  $MPn$ , которое означает, что ряд обрывается на члене порядка  $n$ . Энергия ( $E_0 + E_1$ ) в приближении  $MP1$  тождественно равна хартри-фоковскому значению.  $MP2$  — простейшее используемое на практике приближение для учета электронной корреляции; оно включает только эффекты двукратных возбуждений. В третьем порядке  $MP3$  также учитывает только двукратные возбуждения. В 4-м порядке приближение  $MP4$  описывает (косвенные) эффекты однократных возбуждений, основную часть 3-кратных и, до известной степени, некоторых 4-кратных.

Если вычисления выполняются полностью до любого заданного порядка, теория Меллера–Плессе является размерно-согласованной. Проблема заключается в том, что при возрастании порядка выражения для удержанных членов оказываются алгебраически сложными, и их расчет становится все более трудоемким. В самом деле, при использовании метода Хартри–Фока (без введения приближений для интегралов) затраты времени пропорциональны  $N^4$ , для  $MP2$  —  $N^5$ , для  $MP3$  —  $N^6$  и для  $MP4$  —  $N^7$ . Учет

вкладов трехкратных возбуждений в энергию МР4 является наиболее трудоемким, и обычно применимость теории Меллера–Плессе ограничивается этим уровнем. Модели МР2, МР3 и МР4, реализованные несколькими группами в 1970-е годы, были включены в программу GAUSSIAN [18, 19].

Подробнее с состоянием дел в этой области можно ознакомиться в блестящем обзоре Нобелевского лауреата Дж.А. Попла [1].

В последние годы были развиты модели, позволяющие рассчитывать энергию химических систем с точностью, приближающейся к той, которая достигнута в хороших экспериментальных работах. Описание моделей, данное выше, показывает, что существуют две основные характеристики моделей: базисный набор и степень учета корреляции.

Там проведено подробное сопоставление различных моделей с опытными данными. Проверка выполнена с использованием большого количества (299) экспериментальных разностей энергий для молекул, достигающих размера бензола (42 электрона). Этот набор данных включал в себя 148 значений теплот образования, полученных из теплот атомизации, 85 потенциалов ионизации, 58 величин сродства к электрону и 8 значений сродства к протону. Считается, что все эти экспериментальные результаты известны с погрешностью не выше  $1 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$ . Полученное среднее отклонение расчета от эксперимента составляет  $1,02 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$ , что близко к погрешности измерений.

Следует упомянуть и наихудшие результаты. Наибольшие абсолютные отклонения составляют:  $4,9 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$  для теплоты образования ( $\text{C}_2\text{F}_4$ ),  $7,0 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$  для потенциалов ионизации ( $\text{B}_2\text{F}_4$ ),  $4,2 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$  для сродства к электрону ( $\text{NH}$ ) и  $1,8 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$  для сродства к протону ( $\text{PH}_3$  и  $\text{SH}_3$ ).

Характеризуя современное состояние неэмпирических квантовохимических моделей, можно сказать, что достигнуты большие успехи на пути приближения их предсказательной силы к экспериментальной точности. Для малых молекул, содержащих до 50 электронов, погрешность расчетов не очень далека от погрешности измерений, равной  $\Delta \approx 1 \text{ ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$ .

## 6.2. Статистическая модель

Как мы видели, применение прямых квантово-механических методов к многоэлектронным системам связано с численным решением нерелятивистского уравнения Шредингера для многоэлектронной ( $N$ ) волновой функции  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_j \nabla_j^2 - \sum_{j,i} \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|} + E \right) \Psi = 0, \quad (6.15)$$

где  $\mathbf{r}_j$  — положения электронов, а  $R_i$  и  $Z_i$  — положения и атомные номера ядер;  $\hbar$ ,  $m_e$  и  $e$  — известные фундаментальные константы,  $E$  — энергия. Это уравнение написано в приближении Борна–Оппенгеймера, в котором (с целью изучения динамики электронов) гораздо более тяжелые ядра считаются

неподвижными. Разработанные методы численного решения этого уравнения являются громоздкими и требуют громадного объема вычислений, растущих экспоненциально вместе с числом электронов в рассматриваемой системе. В своей нобелевской лекции В. Кон [3] назвал этот эффект «экспоненциальной стеной», а его коллега по нобелевской премии Дж. А. Попл, обсуждая сложности численных квантово-механических расчетов, назвал их «кошмаром с интегралами» [1]. Это делает необходимым поиск упрощенных подходов к проблемам, некоторые из которых были рассмотрены в предыдущих главах. Одной из таких моделей является статистическая модель (метод самосогласованного поля), предложенная Томасом [20] и Ферми [21] в 1927 году и получившая значительное распространение ввиду ее наглядности и простоты (см. обзоры из [22, 23]).

Статистическая модель вещества (модель, или метод, Томаса–Ферми, сокращенно — МТФ) [23, 24] составляет основу весьма популярного приближенного подхода, который широко применяется для описания свойств вещества на различных его иерархических уровнях (атомное ядро, атом, молекула, твердое тело и т. д.). Особенного развития достигли приложения МТФ к теории экстремальных состояний вещества, возникающих под действием высоких давлений, больших температур или сильных внешних полей. Соответствующие разделы физики и смежных наук (астрофизики, квантовой химии, ряда прикладных дисциплин) и составляют область применения МТФ. Популярность МТФ связана с ее простотой, наглядностью и универсальностью. Последнее означает, что результат расчета по МТФ относится сразу ко всем химическим элементам: переход от элемента к элементу осуществляется простым преобразованием масштаба. Эти особенности МТФ делают ее чрезвычайно удобным инструментом качественного, а во многих случаях и количественного анализа. Разумеется, они возникают как следствие приближенного характера МТФ, которая способна давать точное описание действительности лишь в особых предельных ситуациях. Именно, для применимости МТФ как количественной теории нужно, чтобы плотность вещества или его температура имели достаточно высокое значение.

В этой главе мы затронем теорию МТФ применительно к обычным электронно-ядерным системам (атом, твердое тело, плазма), не касаясь приложений МТФ к теории атомного ядра (см. подробнее гл. 13, [22, 25–29]). Объектом приложения МТФ служит электронная компонента вещества при заданном состоянии ядер. Фононные эффекты в условиях применимости МТФ могут описываться в значительной мере независимым образом (см. в этой связи [30–32]).

Описание связанных состояний электронов в области высоких плотностей  $\rho \geq \rho_0$  при экстремально высоких давлениях  $p \gg e^2/a_0^4 \approx 300$  Мбар или температурах  $T \gg R_y \approx 10^5$  К радикальным образом упрощается, когда электронные оболочки оказываются раздавленными и их свойства описываются квазиклассическим приближением к методу самосогласованного поля — теорией Томаса–Ферми. В этой модели описание квантово-механической системы на языке волновых функций и собственных значений энергии заменяется упрощенным статистическим представлением через среднюю концентрацию

электронов  $n(\mathbf{x})$  и энергию  $\mu$  на границе распределения Ферми, для которых справедливы соотношения для квазиоднородного вырожденного электронного газа [30]<sup>1)</sup>:

$$n(\mathbf{x}) = \frac{p_F^3(\mathbf{x})}{3\pi^2}, \quad (6.16)$$

$$\mu = \frac{p_F^2(\mathbf{x})}{2} + U(\mathbf{x}), \quad (6.17)$$

где  $p_F$  — импульс,  $U(\mathbf{x})$  — потенциальная энергия электрона в поле остальных электронов и внешних источников (ядер).

Учитывая уравнение Пуассона, получим

$$-\Delta U = \frac{\Delta p_F^2}{2} = 4\pi n + \text{внешний источник}; \quad (6.18)$$

и далее легко перейти к нелинейному дифференциальному уравнению для  $p_F^2$  или  $U$  (уравнению Томаса–Ферми).

Численное интегрирование нелинейного дифференциального уравнения Томаса–Ферми позволяет определить электронную плотность  $n(\mathbf{x})$ , по которой восстанавливаются все термодинамические функции электронного газа атомной ячейки.

Локальные характеристики «холодной» электронной системы описываются функцией распределения

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \theta(p_F^2(\mathbf{x}) - p^2), \quad (6.19)$$

где  $\theta(x) = 1$  ( $x > 0$ ),  $\theta(x) = 0$  ( $x < 0$ ). В частности, концентрация в координатном и импульсном пространствах даются формулами ( $d^3p \equiv d\mathbf{p}/(8\pi^3)$ )

$$n(\mathbf{x}) = 2 \int d^3p f(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \quad n(\mathbf{p}) = 2 \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \quad (6.20)$$

(первая из них и ведет к формуле (6.16)). Термодинамические свойства системы описываются выражением для ее энергии:  $E = E_k + E_e + E_i$ , где

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{1}{10\pi^2} \int d\mathbf{x} p_F^5(\mathbf{x}) = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int d\mathbf{x} n^{5/3}(\mathbf{x}), \\ E_e &= \int d\mathbf{x} n(\mathbf{x}) U_e(\mathbf{x}), \quad E_i = 1/2 \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \frac{n(\mathbf{x})n(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Для обобщения МТФ на случай конечных температур нужно заметить (6.19) соответствующим квантово-статистическим выражением

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \left[ \exp\left(\frac{p^2 - p_F^2(\mathbf{x})}{2T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (6.22)$$

Тогда (6.20) дает

$$n(\mathbf{x}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{3/2} I_{1/2}(\lambda(\mathbf{x})), \quad (6.23)$$

<sup>1)</sup> Здесь и ниже используются атомные единицы:  $l = \hbar = m = k = 1$ .

где  $I_n$  — специальная функция Ферми–Дирака [23],  $\lambda = p_F^2/2T$ . Выражение (6.23) заменяет собой (6.16); что же касается (6.17)–(6.18), то эти равенства сохраняют свою силу, но под  $\mu$  теперь нужно понимать химический потенциал «горячей» системы. Располагая решением уравнения Томаса–Ферми при  $T \neq 0$  и выражением для свободной энергии,

$$F = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{5/2} \int dx \left( \lambda I_{1/2}(\lambda) - \frac{2}{3} I_{3/2}(\lambda) \right) + E_e + E_i, \quad (6.24)$$

можно получить полное термодинамическое описание «горячей» системы. В частности, химический потенциал и давление получаются из (6.24) дифференцированием соответственно по числу частиц и объему системы.

Этот расчет существенно упрощается, если на границе системы  $U|_S = 0$ . В этом случае

$$\mu = \frac{1}{2} p_F^2 \Big|_S, \quad P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{5/2} I_{3/2} \left( \frac{\mu}{T} \right). \quad (6.25)$$

Выражение для давления  $P$  можно рассматривать как результат применения принципа квазиоднородности и теоремы вириала ( $P = (2/3)E_k/V$ ) в точках, где электронный газ локально идеален. Именно так обстоит дело в широко применяемой модели сферических ячеек Вигнера–Зейтца (см., например, [25, 33]). В этой модели вещество разбивается на совокупность сферических ячеек, каждая из которых содержит одно ядро и в целом электронейтральна; последнее условие определяет радиус ячейки  $R$ ,  $\int dx n(\mathbf{x}) = Z$  и поведение  $U(x)$  вблизи границы ячейки:

$$U(x) \sim (R - r)^2. \quad (6.26)$$

Использование модели ячеек позволяет перейти от многоцентральной задачи к сферически симметричной одноцентральной, что чрезвычайно облегчает решение уравнения Томаса–Ферми.

Явное решение многоцентральной задачи возможно лишь в области столь высоких давлений или температур (эту область в дальнейшем мы будем называть областью однородности), где МТФ мало отличается от модели идеального однородного газа [25]. В нулевом приближении (идеальный газ) соотношения (6.23)–(6.25) приводят к следующим равенствам:

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{3/2} I_{1/2}(\lambda), \quad F = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} VT^{5/2} \left( \lambda I_{1/2}(\lambda) - \frac{2}{3} I_{3/2}(\lambda) \right), \quad (6.27)$$

$$P = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} T^{5/2} I_{3/2}(\lambda), \quad \lambda = \frac{\mu}{T} = \frac{p_F^2}{2T}.$$

В следующем приближении, учитывающем малые эффекты кулоновского взаимодействия,

$$\delta p_F^2(\mathbf{x}) = 2\delta\mu - 2n \int \frac{d\mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - 2U_e(\mathbf{x}),$$

$$\delta F = \frac{n^2}{2} \int \frac{d\mathbf{x}d\mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + n \int dx U_e(\mathbf{x}) + E_0,$$

где  $E_0$  — энергия кулоновского взаимодействия внешних источников друг с другом. С учетом электронейтральности системы в масштабах  $\sim (Z/n)^{1/3}$  имеем

$$\delta F = -\alpha Z^{2/3} n^{4/3} V, \quad (6.28)$$

где  $\alpha$  — аналог постоянной Маделунга и зависит от конкретной структуры ближнего порядка в системе; в модели ячеек  $\alpha = (9/10)(4\pi/3)^{1/3}$ .

Соответственно,

$$\delta\mu = -\frac{4}{3}\alpha Z^{2/3} n^{1/3}, \quad \delta P = -\frac{\alpha}{3} Z^{2/3} n^{4/3}. \quad (6.29)$$

МТФ можно обобщить и на релятивистский случай, но соответствующие эффекты оказываются заметными лишь при таких условиях (вблизи ядер, при сверхвысоких давлениях или температурах), когда МТФ или вовсе неприменима или мало отличается от модели идеального газа.

МТФ обладает важным свойством автомодельности: в любое физическое соотношение атомный номер  $Z$  входит только в виде комбинаций:

$$xZ^{1/3}, \quad \omega Z^{-1}, \quad pZ^{-2/3}, \quad EZ^{-4/3}, \quad TZ^{-4/3}, \quad PZ^{-10/3}, \quad nZ^{-2}, \quad (6.30)$$

где  $x$  — длина,  $\omega$  — частота,  $p$  — импульс,  $E$  — энергия (свободная энергия) на частицу,  $T$  — температура,  $P$  — давление,  $n$  — плотность. Именно с этим связано удобное свойство универсальности МТФ по заряду ядра  $Z$ .

В основе МТФ положено предположение о малой степени неоднородности системы. В дальнейшем нам понадобится количественная мера этой величины. Ею служит характерная «длина неоднородности»  $L$ , на протяжении которой характеристики системы меняются заметным образом. В области применимости МТФ эту величину можно найти прямо из уравнения (6.18), опуская в нем член с внешними источниками и заменяя  $\Delta$  на  $1/L^2$ :

$$L \sim \frac{P_F}{\sqrt{n}} \sim r_D. \quad (6.31)$$

Эта величина совпадает с радиусом Дебая для электронной подсистемы  $r_D \sim v/\omega$ , где  $v$  — характерная скорость,  $\omega$  — характерная (плазменная) частота.

Для получения суммарных термодинамических характеристик модели наряду с электронными членами необходимо учитывать движение ядер, которое обычно описывается в идеально газовом или квазигармоническом [34] приближениях. При  $T \gg 10^7$  К и твердотельных плотностях необходимо учесть также вклад равновесного излучения.

Модель Томаса–Ферми является квазиклассическим пределом  $\lambda \rightarrow 0$  по отношению к уравнениям самосогласованного поля Хартри, и поэтому модификации этой модели связаны с более детальным учетом корреляционных, квантовомеханических и релятивистских эффектов [30]. Наличие корреляционных поправок вызвано отличием самосогласованного поля Хартри от истинного поля внутри атомной ячейки. Эти поправки являются следствием антисимметрии волновых функций электронов и интерпретируются как обменные корреляционные эффекты. Дополнительно, ввиду неточности принятой в модели картины независимых частиц, возникают эффекты силовой корреляции.

### 6.3. Осцилляционные эффекты

Квантовомеханические поправки возникают вследствие использования квазиклассического формализма и разделяются на регулярную по  $\hbar^2$  (называемую квантовой) часть, отражающую наличие нелокальной связи  $n(x)$  с потенциалом  $U(x)$  из-за принципа неопределенности, и нерегулярную поправку, отражающую немонотонность физических величин, обусловленную дискретным спектром энергии [35]. Существенно, что введение осцилляционной поправки характеризует наиболее современные модификации модели Томаса–Ферми [30], в то время как учет обменных, корреляционных и квантовых поправок [36, 37] является традиционным для физики высоких плотностей энергии. Относительная величина корреляционных и квантовых эффектов контролируется безразмерными параметрами [30],  $\delta_{\text{кор}} \sim \delta_0^\nu$  и  $\delta_{\text{кв}} \sim \delta_{\text{обм}} \sim n/p_F^4$ , которые в области вырождения ( $n^{2/3} \gg T$ ,  $p_F \sim n^{1/3}$ ,  $\delta_0 \sim n^{-1/3}$ ,  $\nu = 2$ ) равны  $\delta_{\text{кор}} \sim n^{-2/3}$ ,  $\delta_{\text{обм}} \sim n^{-1/3}$ , а в классической области ( $n^{2/3} \ll T$ ,  $p_F \sim T^{1/2}$ ,  $\delta_0 \sim n^{1/3}/T$ ,  $\nu = 3/2$ )  $\delta_{\text{кор}} \sim n^{1/2}/T^{3/2}$ ,  $\delta_{\text{обм}} \sim n/T^2$ .

Как показано в работе [23], оболочечные эффекты отражают нерегулярности физических величин, обусловленные дискретным спектром энергии; однако и в случае непрерывного спектра эти эффекты могут проявляться как результат интерференции волн де Бройля. В квазиклассической области ( $\xi \ll 1$ ) оболочечные эффекты описываются выражениями, являющимся периодическими функциями от  $1/\xi$ . Параметр квазиклассичности  $\xi$  равен  $\xi = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{d\mathbf{r}} \right| \ll 1$ , здесь  $\lambda(\mathbf{r})$  — длина волны частицы,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор частицы. В трехмерном случае  $\xi \sim N_e^{-1/3}$  [23].

Ограничиваясь случаем  $T = 0$ , представим оболочечную поправку к плотности в виде

$$n' = n'_1 + n'_2 + n'_3. \quad (6.32)$$

Величина  $n'_1$  описывает нерегулярности, появляющиеся при совпадении уровня Ферми с отдельными уровнями энергии. Второй член в (6.32) описывает не только «энергетические», но и пространственные оболочечные осцилляции. Такую величину  $n'_3$  имеет нормировочную природу и удовлетворяет равенству

$$\int dx (n'_2 + n'_3) = 0. \quad (6.33)$$

Оболочечные осцилляции термодинамических величин определяются, согласно (6.33), только слагаемым  $n'_1$ . Если же нас интересуют оболочечные осцилляции самой плотности, то для них важно только слагаемое  $n'_2$ .

Приведем, следуя [23], полное решение задачи для одномерного случая, рассматривая финитное движение с точками поворота  $R$  и  $R'$ . Введем обозначения

$$S = \int_R^x dx p_F, \quad \tau = \int_R^x \frac{dx}{p_F},$$

для функции действия и времени движения на границе Ферми (аналогичные обозначения с индексом 0 отвечают пределам  $R$  и  $R'$ ). Кроме того, введем периодическую функцию

$$[f(S_0)]^* = f(S_0) \quad (-\pi/2 < S_0 < \pi/2)$$

с периодическим продолжением вне этой области; разрывы этой функции, как ясно из условия квантования, отвечают как раз совпадению границы Ферми с уровнем энергии. В этих обозначениях

$$n'_1 = -\frac{2}{\pi p_F \tau_0} [S_0]^*, \quad \int_R^{R'} dx n'_1 = -\frac{2}{\pi} [S_0]^*. \quad (6.34)$$

В сочетании с выражением  $n = 2p_F/\pi$  (одномерная МТФ) это ведет к изменению полного числа частиц на двойку при прохождении каждого уровня энергии. Далее

$$n'_2 = -\frac{\operatorname{cosec}(\pi\tau/\tau_0)}{p_F \tau_0} \cos\left(2S - 2\frac{\tau}{\tau_0} [S_0]^*\right). \quad (6.35)$$

При переходе к полуинфинитному движению ( $R' \rightarrow \infty$ )  $\tau_0 \rightarrow \infty$  и

$$n'_1 = 0, \quad n'_2 = -\frac{1}{\pi p_F \tau} \cos(2S). \quad (6.36)$$

Аналогично решается и трехмерная сферически-симметричная задача, где добавляется суммирование по орбитальному числу, ведущее к частичному сглаживанию осцилляции (например, вместо разрывов самой функции  $n'_1$  возникают разрывы лишь ее производной). Введем обозначения <sup>1)</sup>,

$$S = \int_R^r dr \sqrt{p_F^2 - \frac{1}{4r^2}} \approx \int_0^r dr p_F + \frac{\pi}{2}, \quad \tau = \int_0^r \frac{dr}{p_F}, \quad \delta = \int_0^r \frac{dr}{r^2 p_F}.$$

для функции действия, времени движения и производной угла поворота по моменту в состоянии с нулевым орбитальным моментом. Тогда трехмерные аналоги выражений (6.34), (6.36) примут вид

$$\int dx n'_1 = -\frac{2}{\pi \delta_0} [S_0^2]^*, \quad (6.37)$$

$$n'_2 = -\frac{1}{4\pi^2 r^2 p_F \tau \delta} \sin\left(2 \int_0^r dr p_F\right) \quad (6.38)$$

(более общие соотношения см. в [38, 39]).

<sup>1)</sup> Когда в начале координат действуют кулоновы силы притяжения (это случай, к которому и относятся приводимые формулы), то,  $R = 0$  и символ  $\int$  означает вычитание из интеграла величины  $\int_0^r dr r^{-3/2} \sqrt{2Z}$ .

Имеется и другой способ описания оболочечных эффектов, более прозрачный физически и пригодный в общем случае неразделяющихся переменных. Он основан на рассмотрении квазиклассической функции Грина, имеющей в одномерном случае вид

$$G(x, x', \varepsilon) = -\frac{1}{\sqrt{P_\varepsilon(x)P_\varepsilon(x')}} \sum_j \exp \left[ i \left( \int_{\Gamma_j} ds |p_\varepsilon| - \frac{\pi}{2} n_j \right) \right], \quad (6.39)$$

$$P_\varepsilon = \sqrt{2(\varepsilon - U)},$$

здесь  $\varepsilon$  — энергия частицы в методе Хартри,  $\Gamma_j$  — траектория классического движения от  $x$  и  $x'$ . Существует, вообще говоря, целый набор таких траекторий, одна из которых ( $j = 0$ ) соединяет эти точки, так сказать, «напрямую», а остальные — с тем или иным числом отражений в точках поворота. Число таких отражений равно  $n_j$ , а последнее слагаемое в фазе (6.39) отвечает изменению фазы при отражениях.

Плотность выражается через функцию Грина в совпадающих точках. Траектория с  $j = 0$  при этом вырождается в точку, а соответствующее слагаемое выражения (6.39) утрачивает осциллирующий характер и ведет к результату МТФ. За оболочечные эффекты ответственны остальные слагаемые выражения (6.39). В случае полуинфинитного движения (рис. 6.1 а) в сумме (6.39) есть два слагаемых:  $j = 0; 1$  с  $n_0 = 0, n_1 = 1$ . При финитном же движении число слагаемых бесконечно. К их числу относятся прежде всего слагаемые с полным обходом цикла ( $n_j$  — четное число); сумма по таким циклическим траекториям (рис. 6.1 в) образует член  $n'_1$ . Кроме того, имеются «полуциклические» траектории (рис. 6.1 б), для которых  $n_j$  — нечетное число; сумма по таким траекториям дает член  $n_2$ , описывающий пространственные осцилляции плотности. Последние, таким образом, возникают в результате интерференции падающей и отраженной в точке поворота волн (стоячая волна де Бройля).

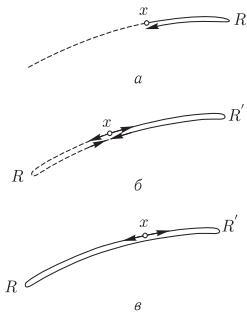


Рис. 6.1. Траектории, отвечающие оболочечным эффектам. а) Инфинитное в одну сторону движение, б) финитное движение — полуциклическая траектория, в) то же — циклическая траектория

В трехмерном случае качественная картина остается прежней, хотя соответствующие выражения заметно усложняются. Отметим прежде всего, что в качестве полуциклических нужно брать линейные траектории, когда частица возвращается от точки поворота по тому же пути, что и при движении к этой точке. Это соответствует истинной точке поворота (рис. 6.1) с исчезновением всех компонент импульса (именно с этим связан выделенный характер s-волны, см. выше). Далее, к числу точек поворота следует причислить

и кулонов центр притяжения, который не пропускает через себя частицы из-за известных квантовомеханических эффектов. Однако неприменимость квазиклассики в этой точке ведет к тому, что изменение фазы при отражении имеет обратный знак по сравнению с обычным; в этом можно убедиться, используя точное выражение для функции Грина в кулоновом поле [40] и сшивая его с квазиклассическим выражением подобно тому, как это делается в случае обычной точки поворота [41, 42].

Отметим, что оболочечные эффекты нарушают автомодельность МТФ существенно более радикальным образом, чем другие эффекты. После перехода к переменным (6.30) остается сложная нерегулярная зависимость от  $Z$ , которая и соответствует реальным осцилляциям физических величин с изменением состава вещества.

Рассмотрим, следуя [23], оболочечные эффекты при ненулевой температуре, а также их вклад в термодинамические величины. Сразу же отметим, что в «горячей» системе появляется ряд факторов, ведущих к сглаживанию осцилляции. Принятая нами постановка задачи позволяет учесть главный из них — размытие распределения электронов по уровням. Оказывается, что в интересующей нас области такое сглаживание описывается зависящим от температуры коэффициентом

$$\begin{aligned} n'_2(T) &= k_n n'_2(0), \\ \delta F(T) &= k_F \delta F(0) \equiv k_F \delta E. \end{aligned} \quad (6.40)$$

В рассматриваемой области давлений и температур вещество металлизировано; соответственно при любой температуре электроны заполняют участки и непрерывного, и дискретного спектров (рис. 6.2). Граница раздела этих участков отвечает, согласно выражению (6.26), значению энергии

$$\bar{\mu} = 0; \quad (6.41)$$

в действительности она находится несколько ниже из-за размытия уровней в зоны и их перекрытия. Однако при выполнении условия квазиклассичности на уровне  $\bar{\mu}$ , имеющего вид  $(Z/n)^{1/2} U^{1/2} \gg 1$  или

$$n \ll Z^4, \quad (6.42)$$

эти эффекты малы и с логарифмической точностью не сказываются на результатах (подробнее см. [43]).

Оболочечные добавки к плотности задаются (см. также [44]) следующим образом:

$$n'(T, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{f(\mu - \varepsilon) \partial n'(0, \varepsilon)}{\partial \varepsilon}. \quad (6.43)$$

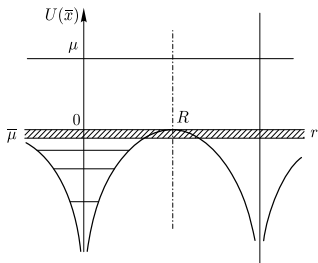


Рис. 6.2. Схема уровней сильно сжатого вещества. Заштрихована область перекрытия зон

Используя (6.38), находим, что

$$k_n = \frac{2\pi\tau T}{\text{sh}(2\pi\tau T)}. \quad (6.44)$$

Поскольку  $\tau \sim Z^{1/3}n^{-2/3}$ , осцилляции плотности становятся экспоненциально малыми при  $T > n^{2/3}Z^{-1/3}$  (в случае относительно слабо сжатого вещества — при  $T > Z$ ). Если же температура меньше указанного значения, то коэффициент (6.44) близок к единице и зависимость  $n'$  от  $T$  определяется вторым множителем  $n'(0, \mu)$  (см. (6.40)). С ростом температуры химический потенциал становится отрицательным и растет по абсолютной величине. Поэтому увеличение  $T$  ведет к исчезновению осцилляций, отвечающих все более и более глубоким оболочкам, для которых потенциальная энергия становится сравнимой с величиной  $\bar{\mu}$ . Эти выводы подтверждаются сравнением с результатами точного расчета по методу Хартри–Фока (см. [45, 46]).

Добавки к свободной энергии определяются величиной  $n'_1$ , отличной от нуля лишь в области дискретного спектра (см. (6.36), (6.38)). Поэтому, используя (6.43), нужно положить верхний предел равным  $\bar{\mu} = 0$  (см. (6.41)). Аналогично, легко видеть, что само выражение  $n'(0, \varepsilon)$  равно  $n'(0, \bar{\mu})$  при  $\varepsilon > \bar{\mu}$ . Оценка добавки к свободной энергии с использованием (6.43) дает

$$\delta F(T) = -T \ln \left[ \exp \left( \frac{\mu}{T} \right) + 1 \right] \int dx n'_1(0) - \int_{-\infty}^0 d\varepsilon f(\mu - \varepsilon) \int dx n'_1(0).$$

Интегрируя второй член по частям, легко видеть, что он вносит относительный вклад порядка  $1/\mu\tau_0$  (вырожденный случай) и  $1/T\tau_0$  (классический случай). Эти параметры, с учетом  $\tau_0 \sim n^{-1/2}$ , оказываются малыми всюду в области применимости МТФ. Поэтому выражение для  $\delta F(T)$  сводится к первому члену. В частности, при  $T = 0$  (6.37) дает

$$\delta E = -\mu_0 \int dx n'_1(0) = \frac{2}{\pi} \frac{\mu_0}{\delta_0} [S_0^2]^*, \quad (6.45)$$

где  $\mu_0$  — «холодный» химический потенциал, остальные величины в (6.45) отнесены к границе  $\bar{\mu}$ . Отсюда

$$k_F = \frac{1}{\mu_0} T \ln \left[ \exp \left( \frac{\mu}{T} \right) + 1 \right]. \quad (6.46)$$

Этот коэффициент также уменьшается с увеличением температуры, но существенно медленнее, чем коэффициент  $k_n$  (6.44); из соотношений (6.27) можно видеть, что коэффициент  $k_F$  (6.46) уменьшается степенным образом, становясь пренебрежимо малым лишь при  $T \gg \mu_0$ .

Физическая природа оболочечных осцилляций свободной энергии состоит в том, что при изменении плотности вещества или его состава, когда значение действия в (6.45) становится равным нечетному числу  $\pi/2$ , происходит «выдавливание» уровней энергии из дискретного спектра в непрерывный или

обратно (см. рис. 6.2)<sup>1)</sup>. Это и ведет к нерегулярностям в поведении физических величин. Оставляя пока более подробное обсуждение этих вопросов, приведем здесь явные выражения, справедливые в области однородности и относящиеся к случаю  $T = 0$ .

Будем пользоваться вместо плотности объемом ячейки  $v = Z/n$ , обозначим  $\mathfrak{Z} = 5P/(3\pi^2)^{2/3}$ . Тогда имеем, что

$$S_0 = kZ^{1/2}v^{1/6} - \frac{\pi}{2}, \quad k = 3 \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/6} \ln \frac{1 + \sqrt{3}}{\sqrt{2}} \approx 1,56. \quad (6.47)$$

Аналогично [43]

$$\delta_0 = \frac{(36\pi)^{1/6}}{36} \ln(Z^3 v) Z^{-1/2} v^{-1/6}.$$

Отсюда для оболочечной поправки к энергии имеем

$$\delta E = 36 \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/6} \frac{Z^{7/6} v^{-1/2}}{\ln(Z^3 v)} [S_0^2]^*; \quad (6.48)$$

эта величина, как и (6.45), отнесена к объему одной ячейки.

Важно отметить, что в действительности поправка (6.48) соответствует нестабильной ситуации вблизи точек нерегулярности:

$$v_n = Z^{-3} \left( \frac{\pi n}{k} \right); \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.49)$$

Это видно из выражения для оболочечной добавки к давлению, которая получается из (6.48) дифференцированием по объему последнего, наиболее быстро меняющегося его сомножителя,

$$\delta P = -12 \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/6} k \frac{Z^{5/3} v^{4/3}}{\ln(Z^3 v)} [S_0]^* \quad (6.50)$$

(см. штриховые линии на рис. 6.3). Хорошо известно, что такое состояние неустойчиво, и перестраивается, в результате чего возникает картина, изображенная на рис. 6.3 жирной сплошной кривой. Она отвечает фазовому переходу I рода между фазами, в одной из которых  $n$ -й уровень лежит в дискретном, в другой — в непрерывном спектре. Картина осцилляции объема при изменении давления или атомного номера описывается рис. 6.3 (повернутым на  $90^\circ$ ) и рис. 6.4. Соответствующее аналитическое выражение имеет вид

$$\delta v/v = -36 \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/6} \cdot \frac{kZ^{1/3} [S_0]^*}{(3\pi^2)^{2/3} \mathfrak{Z}^{1/5} \ln(Z^{20/3}/\mathfrak{Z})}, \quad (6.51)$$

где

$$S_0 = \frac{kZ^{2/3}}{\mathfrak{Z}^{1/10}} - \frac{\pi}{2};$$

<sup>1)</sup> Оболочечные эффекты исчезают после ухода в непрерывный спектр всех уровней энергии, что отвечает условию  $n > Z^4$  (см. (6.42)).

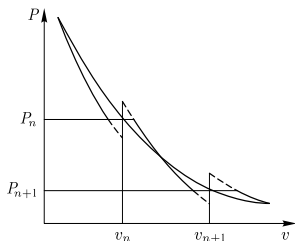


Рис. 6.3. Зависимость давления от объема (оболочечные эффекты)

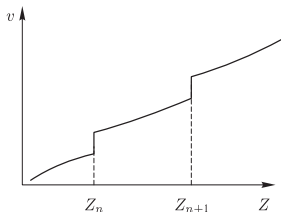


Рис. 6.4. Зависимость атомного объема от атомного номера (оболочечные эффекты)

точки нерегулярности соответствуют условиям (точки фазового перехода):

$$\mathfrak{Z}_n = Z^{20/3} \left( \frac{k}{\pi n} \right)^{10}, \quad Z_n = \mathfrak{Z}^{3/20} \left( \frac{\pi n}{k} \right)^{3/2}. \quad (6.52)$$

Стоит специально отметить большую величину численного коэффициента в (6.51), что делает оболочечные осцилляции вполне заметными даже в условиях их буквенной малости.

Особенно ярко проявляются оболочечные эффекты применительно к величинам, получающимся из давления его дальнейшим дифференцированием по объему. Так, модуль упругости (рис. 6.5) оказывается вообще равным нулю в области сосуществования фаз, а коэффициент Грюнайзена для электронной компоненты, отвечающей еще одному дифференцированию по объему, даже заходит в отрицательную область.

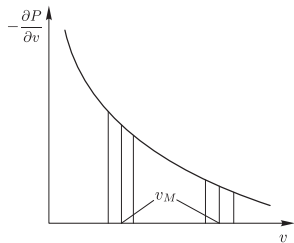


Рис. 6.5. Зависимость сжимаемости от объема (оболочечные эффекты)

Многочисленные модификации МТФ, отвечающие обменным, корреляционным, квантовым и оболочечным эффектам, были получены в предположении, что их вклад в физические величины относительно мал. Фактически, когда речь идет о первых членах разложения по соответствующим параметрам  $\delta$ , малость первого

члена разложения позволяет отбросить все остальные члены. Соответствующие условия, выраженные на языке плотности и температуры, показаны на диаграмме рис. 6.6.

Однако выполнение этих условий еще не гарантирует применимость теории ко всем физическим характеристикам вещества. Дело заключается в уже отмеченной существенной неприменимости МТФ в области вблизи ядра (и на периферии изолированного атома). В этой области квантовые эффекты на-

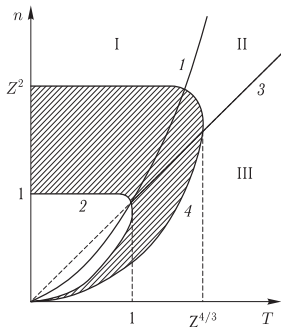


Рис. 6.6. Границы применимости МТФ. 1 — кривая вырождения, 2 — граница применимости МТФ, 3 — кривая равенства обменных, квантовомеханических и корреляционных эффектов, 4 — граница области однородности. I — область преобладания обменных и квантовомеханических эффектов для вырожденного газа, II — то же для бoльцмановского газа, III — область преобладания корреляционных эффектов. Заштрихована область, в которой использование МТФ оправдано

столько существенны, что это обесценивает не только саму МТФ, но и ее обобщения. Это проявляется, например, в расхождении на малых расстояниях квантовой добавки к энергии. Поэтому те физические величины, для которых обсуждаемая область существенна (полная энергия, поляризуемость нейтрального атома и др.), должны описываться особым образом.

#### 6.4. Квантовые и обменные поправки

Имея в виду главным образом область вблизи ядра (и, соответственно, квантовые эффекты), мы отметим два пути модификации МТФ. Первый состоит в рассмотрении квантовой добавки равноправно с нулевым, отвечающим МТФ членом [47–50]. Разложения в ряд по параметру  $\delta_{\text{кв}}$  при этом не производится. Процесс последовательных приближений состоит в том, что на первом этапе рассматривается сама МТФ, на следующем — МТФ и равноправно с ней первая квантовая добавка, на третьем — то же плюс квантовая добавка второго порядка по  $\delta_{\text{кв}}$  и т. д., причем на каждом этапе не делается никаких дополнительных предположений. Такой подход (его иногда называют квантово-статистической моделью, сокращенно КСМ) оказывается весьма эффективным. Процесс последовательных приближений быстро сходится, и уже на втором этапе достигается достаточно хорошее описание. Во всяком случае, соответствующий результат представляет собой неизмеримо лучший исходный пункт для последующих улучшений (если в них есть необходимость), чем сама МТФ.

В случае равной нулю температуры программу КСМ можно реализовать, рассматривая минимум функционала  $E(n) = E - \mu \int dx n$ . Можно действовать как прямым вариационным методом [47, 48], так и решать уравнение Лагранжа–Эйлера [49, 50]:

$$[\zeta \Delta + p_{\text{F}}^2(x)]\psi = (3\pi^2)^{2/3} \psi^{7/3}, \quad (6.53)$$

где  $\psi^2 \equiv n$ ,  $\zeta = 1/9$ . Уравнение (6.53) напоминает уравнение Шредингера, отличаясь от него нелинейным членом, а также величиной  $\zeta$ .

Успех программы КСМ связан со следующим простым обстоятельством. Неприменимость МТФ на малых расстояниях проявляется в том, что она ведет к неправильному поведению плотности в этой области: как видно из уравнения (6.53), при  $\zeta = 0$  плотность сингулярна в нуле,  $\psi \sim r^{-3/4}$ ,  $n \sim r^{-3/2}$ . Между тем при точном квантово-механическом рассмотрении плотность описывается регулярной функцией. Оказывается, что уже на втором этапе КСМ поведение плотности радикально исправляется: как видно из (6.53), его решение в нуле имеет вид  $n \sim 1 - (Zr/\zeta)$ . Поэтому следующие этапы КСМ ведут лишь к незначительным количественным уточнениям результата.

Другой способ исправления МТФ на малых расстояниях от ядра основан на том, что в этой области потенциал, создаваемый электронами, практически постоянен и может быть положен равным константе  $C$ . В то же время задача с потенциалом  $U' = -Z/r + C$  может быть решена в явной форме. Отсюда без каких-либо дополнительных допущений можно прийти к следующему выражению для функции распределения:

$$f = f_1 - f_2 + f_3, \quad (6.54)$$

здесь  $f_1$  — точное квантово-механическое выражение  $f$  для потенциала  $U'$ , которое можно выразить через функции Уиттекера [40];

$$f_2 = \theta[2(\mu - U') - p^2]$$

— квазиклассическое выражение для того же потенциала;

$$f_3 = \theta[2(\mu - U') - p^2]$$

— обычный результат МТФ. На малых расстояниях, где потенциал близок к  $U'$ , остается лишь первый член, а в области относительно больших расстояний, где движение становится квазиклассическим, восстанавливается выражение МТФ (см. [51]).

Существуют и иные методы исправления МТФ на малых расстояниях. Мы упомянем лишь о работе [52], где предлагалось ввести специальное «обрезание» спектра энергии электронов снизу, что ведет к резкому уменьшению плотности в окрестности ядра. Однако к настоящему времени наиболее разработанным и эффективным является метод КСМ.

## 6.5. Применение МТФ к изолированному атому

Рассмотрим применение МТФ к нейтральному изолированному атому с достаточно большим значением  $Z$ . В рамках МТФ ему отвечают

$$\mu = 0, \quad p_F^2(x) = \frac{2Z}{r(1 + \xi)^2}, \quad \xi = \frac{r}{\alpha}, \quad \alpha = \left(\frac{9}{2Z}\right)^{1/3}, \quad (6.55)$$

где для  $p_F^2$  использовано приближенное выражение [53], которое будет изменяться далее.

Начнем с вопроса о полной энергии электронной оболочки атома. МТФ дает для этой величины значение  $E(Z) = -0,769Z^{7/3}$ , которое значительно превышает по абсолютной величине результаты эксперимента и квантово-

механических расчетов. Это происходит из-за неприменимости квазиклассического приближения на малых расстояниях от ядра. Кроме того, приведенная формула не отражает хотя и слабых, но вполне заметных осцилляций функции  $E(Z)$ , связанных с оболочечными эффектами. На рис. 6.7 приведены результаты вычисления энергии атома по МТФ, по модели Томаса–Ферми–Дирака, по КСМ (с включением обменной поправки) и по методу Хартри–Фока. Видно, что учет квантовых эффектов значительно улучшает результат: например, для  $Z \approx 20 - 30$  расхождение с результатами квантово-механического расчета уменьшается с  $\approx 25\%$  до  $\approx 5\%$ .

Оболочечный вклад в энергию атома можно оценить, считая, что основную роль играют малые значения  $\mu$  и соответственно большие значения  $r$ , где квазиклассика неприменима. Поэтому можно рассчитывать лишь на получение качественных результатов. Первый из них состоит в объяснении крайне малой амплитуды осцилляций; ее относительная величина  $\delta E/E$  существенно меньше параметрической оценки,  $\delta_{\text{кв}} \sim Z^{-2/3}$ . Дело заключается как раз в непригодности квазиклассического описания для рассматриваемых осцилляций. В существенной для них области наружных оболочек атома, где заряд ядра практически экранирован, амплитуда осцилляции не зависит от  $Z$ . Соответственно,

$$\frac{\delta E}{E} \sim Z^{-7/3}, \quad (6.56)$$

что находится в согласии с рис. 6.7.

Второй вывод касается типа осцилляции. Учитывая (6.37), легко видеть, что осцилляции энергии сглажены по сравнению с осцилляциями плотности. Именно,

$$\delta E \sim \left[ S_0^2 - \frac{\pi^2}{4} S_0 \right]', \quad (6.57)$$

что отвечает волнообразному поведению с разрывом не первой, как в  $\delta n$ , а второй производной. Это также качественно согласуется с рис. 6.7. Точки разрыва отвечают «магическим» значениям  $Z_{\text{маг}} = \dots 19, 37, 55 \dots$  (щелочные металлы), для которых уровень с квантовыми числами  $n$  и  $l = 0$  выходит в непрерывный спектр и  $S_0 = \pi[n - (1/2)]$  при  $E = 0$ . Из выражения (6.57)

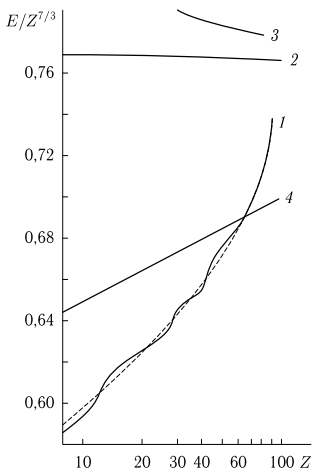


Рис. 6.7. Энергия электронной оболочки атома. 1 — по модели Хартри [54], 2 — по МТФ, 3 — по модели Томаса–Ферми–Дирака, 4 — по КСМ

видно, что узлы осцилляции расположены как при  $Z_{\text{маг}}$ , так и в промежутках между ними. И это свойство качественно соответствует рис. 6.7, на котором узлы соответствуют  $Z \approx 21, 29, 37, 53, 59 \dots$

Переходим к описанию распределения плотности в сердцевине атома (при  $Z^{-1} \ll r \ll 1$ ). В этой области квантовые эффекты малы, а оболочечные вполне заметны из-за большого численного коэффициента в формуле (6.38). Использование этой формулы и (6.55) дает

$$\delta n \sim \sin \left( \sqrt{8Z\alpha} \arccos \frac{\alpha - r}{\alpha + r} \right) \quad (6.58)$$

(неосциллирующий фактор для простоты опущен) и ведет к хорошему — около 5% — согласию с квантово-механическими расчетами для атомов среднего и большого атомного номера (рис. 6.8) [38]. Непосредственно на опыте измеряется не плотность, а атомный формфактор  $F(\mathbf{q}) = \int dx n(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}$ , где  $\mathbf{q}$  — переданный при рассеянии быстрых электронов или фотонов импульс. Пользуясь формулами (6.38), (6.55) и действуя методом стационарной фазы, можно прийти к выражению [58]

$$\delta F(q) \sim \cos[1,82Z^{1/3}(\pi - x)], \quad (6.59)$$

где  $x = q/1,1Z^{2/3}$ . Включение этой поправки заметно улучшает ход функции  $F(q)$  (рис. 6.9).

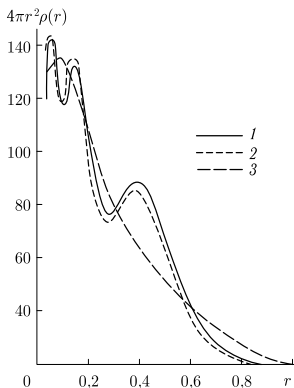


Рис. 6.8. Радиальная плотность электронов в атоме ртути. 1 — по модели Хартри [54], 2 — по МТФ, 3 — по МТФ с оболочечными поправками [38]

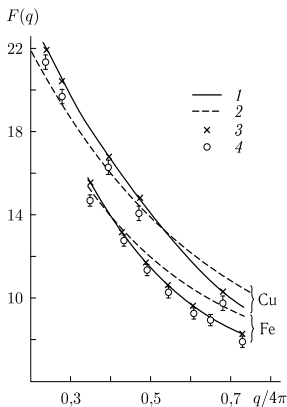


Рис. 6.9. Атомный форм-фактор для железа и меди. 1 — по модели Хартри-Фока [55], 2 — по модели Томаса-Ферми-Дирака [56], 3 — то же с оболочечной поправкой, 4 — эксперимент [57]

Следующая величина, о которой будет идти речь, — потенциал ионизации атома  $p_F^2$ . С учетом квантовых эффектов он вычислялся еще в работе Компанейца и Павловского [59]. Эти результаты были использованы для вычисления поляризуемости и магнитной восприимчивости атома и оказалось, что по сравнению с МТФ наблюдается заметное сближение теоретических и экспериментальных данных. Так, по утверждению автора работы [60], указанные величины для ксенона имеют (в некоторых единицах) экспериментальные значения, соответственно, 4,10 и 43,9, в МТФ — 24,8 и 113,0, а с учетом квантовых эффектов — 4,06 и 45,7. В работе [34] был получен потенциал  $p_F^2$  с учетом оболочечных эффектов (см. рис. 6.10).

В целом можно констатировать, что обобщенная МТФ, включающая квантовые, обменные и оболочечные эффекты, значительно лучше описывает свойства тяжелого атома, чем стандартная МТФ. Противоположное утверждение [61] основано на фактических ошибках, указанных в работе [60]. Наиболее важные и широко используемые приложения МТФ к физике экстремальных состояний вещества относятся к его термодинамике.

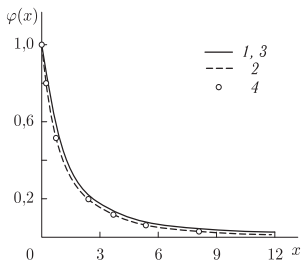


Рис. 6.10. Атомный потенциал ( $\varphi(x) = (r/Z)p_F^2$ ,  $r = 0,885Z^{-1/3}x$ ). 1 — по модели Хартри–Фока, 2 — по МТФ, 3 — по МТФ с оболочечной поправкой, 4 — КСМ [36]

## 6.6. Уравнение состояния Томаса–Ферми

Применение МТФ и ее обобщений к выводу уравнения состояния вещества осуществляется, как правило, в рамках модели ячеек Вигнера–Зейтца. Не останавливаясь на деталях (см. [25, 33, 62]), укажем, что наиболее полные данные по уравнению состояния в МТФ содержатся в работах Лэттера [63], (холодное вещество) и [64], (горячее вещество). Значительная часть этих данных, относящихся к широкому диапазону давлений и температур, неверна из-за неприменимости самой МТФ; этот вывод подтверждается и прямым сравнением с имеющимися экспериментальными данными [65].

Исправление МТФ путем включения рассмотренных выше эффектов позволяет выделить достоверную часть этих данных и получить улучшенное уравнение состояния вещества, справедливое в более широком диапазоне давлений и температур. Выше приведены общие выражения для соответствующих поправок к уравнению состояния, а также их явный вид в области однородности.

В области не очень высоких температур (см. рис. 6.6) основной вклад в уравнение состояния вносят обменные и квантовые эффекты. Первые были исследованы в наиболее полном виде в работе [66]. Однако ее результаты в значительной мере обесценены тем, что в ней совершенно не учитывались

квантовые эффекты. Последние, как было выяснено [23], вносят численно тот же (с точностью до коэффициента, равного примерно 1/3) вклад.

Количественная теория квантовых эффектов в уравнении состояния вещества была построена в работе [67], а численное решение задачи для холодного

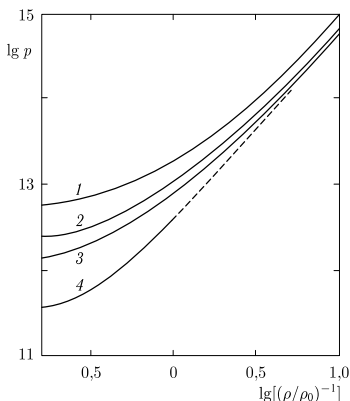


Рис. 6.11. [68]. Уравнение состояния железа ( $\rho_0$  — нормальная плотность). 1 — по МТФ, 2 — по модели Томаса–Ферми–Дирака, 3 — по МТФ с обменными и квантовыми поправками, 4 — эксперимент [65]

вещества содержится в работе [68], из которой мы заимствуем рис. 6.11. Из него видно, что квантовые и обменные добавки действительно ведут к сближению результата МТФ с экспериментальными данными<sup>1)</sup>. К аналогичному выводу приводят также результаты работы [71], относящиеся, подобно [68], к холодному сжатию железа. В работе [72] уравнение состояния с учетом квантовых эффектов сравнивалось с экспериментом в области высоких температур и также было отмечено сближение данных.

Хотя в области низких давлений МТФ, даже исправленная путем учета квантовых и других эффектов, непосредственно и не применима, она ведет к разумным результатам для атомных объемов (или плотностей) несжатого вещества [68, 73]. Напомним в этой связи, что сама МТФ при равном нулю давлении ведет к бесконечному радиусу атома [74, 75]. В рамках модели Томаса–Ферми–Дирака или при учете квантовых эффектов положение меняется: несжатое вещество приобретает конечную плотность. Хотя эти модели и неспособны описать оболочечные осцилляции атомного объема, они передают усредненный по периодической системе ход этой величины. При этом наилучшие результаты дает квантово-статистическая модель.

Сказанное иллюстрируется рис. 6.12а, заимствованным из работы [73]. Эмпирическая кривая этого рисунка отражает осцилляции атомного объема, связанные с оболочечными эффектами. Пики соответствуют щелочным металлам, для которых в атоме впервые появляется электрон с данным значением главного квантового числа, с  $l = 0$ . Нисходящие ветви кривой отвечают плотно упакованным структурам; описание этих ветвей можно найти в работе [77]. С ростом  $Z$  кривые проходят через минимум и восходящие ветви соответствуют структурам с неплотной упаковкой. Именно по этой

<sup>1)</sup> В работах [68, 69] содержится полное термодинамическое описание в рамках МФТ с учетом квантовых и обменных эффектов. В работе [70] содержатся подробные таблицы термодинамических величин, вычисленных по МФТ с учетом квантовых и обменных поправок.

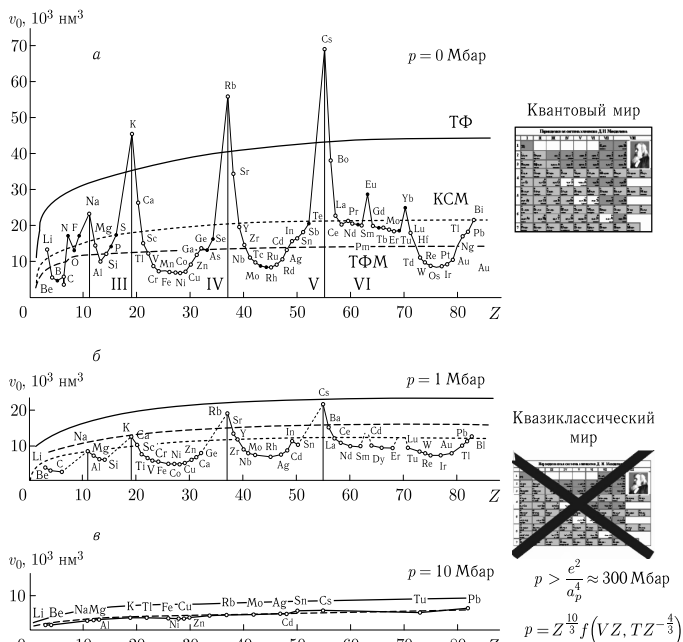


Рис. 6.12. Изменения атомных объемов элементов  $v_0(Z)$  с ростом давления [65, 73, 76]

причине атомный объем элемента нулевой группы, для которого можно было бы ожидать наименьшего значения, в действительности мало отличается от атомного объема следующего за ним щелочного металла. Это связано с тем, что кристалл элемента нулевой группы относится к классу рыхлых вандерваальсовых структур. Поэтому рассматриваемая кривая характеризуется разрывом не самой функции, а ее производной.

Значительный интерес представляет вопрос о том, как ведут себя оболочечные эффекты с ростом давления. Общепринятая точка зрения состоит в том, что они уменьшаются с ростом давления, становясь пренебрежимо малыми при  $p > 1$  (в обычных единицах это соответствует 300 Мбар). При более высоких давлениях свойства вещества универсализуются, а зависимость его характеристик от атомного номера становится гладкой и монотонной. Приведенные на рис. 6.12 б, в эмпирические кривые [65, 73]), на первый взгляд оправдывают эту точку зрения.

Однако результаты [23] показывают, что на самом деле ситуация с оболочечными эффектами более сложна. Осцилляции типа разрыва производной функции  $v(Z)$  (см. рис. 6.12) действительно «вымирают» при давлении порядка 1, но при больших давлениях им на смену приходят более резкие осцилляции типа разрыва самой функции  $v(Z)$ . Физически это соответствует тому, что с увеличением давления становятся плотно упакованными и структуры, отвечающие восходящим ветвям рис. 6.12а; благодаря этому минимумы кривой  $v(Z)$  пропадают и возникает разрыв в атомном объеме между элементом нулевой группы и соседним щелочным металлом. Сами точки разрыва остаются теми же, что и при нулевом давлении, пока мы находимся далеко от пределов области однородности ( $n \ll Z^2$ ). Однако при большем давлении «магические» значения  $Z$  начинают смещаться в сторону больших  $Z$ , как это видно из формулы (6.52). Это происходит потому, что из-за влияния соседних ячеек характер заполнения уровней становится все более отличным от водородо-подобного. Лишь при  $n > Z^4$  оболочечные осцилляции полностью пропадают из-за перехода всех уровней в непрерывный спектр. Оболочечные эффекты на языке функции  $v(p)$  (уравнение состояния) проявляются в возникновении серии фазовых переходов 1-го рода, отвечающих «выдавливанию» глубинных уровней атомов в непрерывный спектр.

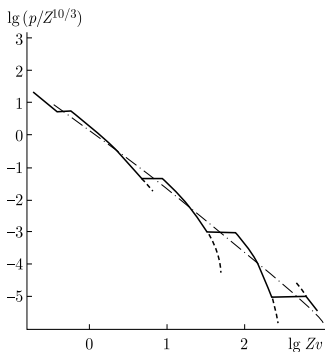


Рис. 6.13. Уравнение состояния с учетом оболочечных эффектов ( $Z = 100$ )

$H \gg Z^{4/3}$ , все электроны занимают наинизший уровень Ландау и имеют спин, противоположный внешнему полю. Пока  $Z^3 \gg H \gg Z^{4/3}$ , атом остается сферически симметричным, но его радиус уменьшается с увеличением поля по закону  $Z^{1/5} H^{-2/5}$ . При еще больших полях  $H \gg Z^3$  атом вытягивается

Такие переходы будут, конечно, происходить и вне области однородности. Это иллюстрируется рис. 6.13, заимствованным из работы [78] (см. также [43]). Подобные фазовые переходы будут происходить, например, внутри звезд «белых карликов», проявляясь в виде разрывов в распределении плотности и в появлении особенностей на кривой «масса-радиус». Кроме того, как отметил А.С. Компанец, скрытая теплота фазового перехода могла бы оказаться заметным фактором эволюции звезды [23].

Коснемся еще одного экстремального фактора — внешнего сильного магнитного поля, ограничившись рассмотрением его влияния на структуру многоэлектронного атома (см. [79–85]). В сильном поле <sup>1)</sup>,

<sup>1)</sup> Магнитная индукция поля измеряется в единицах  $m^2 e^3 c / \hbar^3 = 10^9$  Гс.

в направлении поля, а системе атомов выгодно образовать своеобразную полимерную структуру.

Интересуясь этой проблемой с точки зрения МТФ, мы должны рассматривать меньшие поля,  $1 \ll H \ll Z^{4/3}$ , когда выполнено условие квазиклассичности и по отношению к полю,  $r_{Hr_F} \gg 1$ , где  $r_H = p_F/H$  — ларморовский радиус. При этих условиях действие поля сводится к перевороту спинов электронов и мы имеем дело с атомным аналогом парамагнетизма Паули. Распределение плотности электронов характеризуется теперь двумя функциями:  $n_+ = [-2(U+H)]^{3/2}/6\pi^2$ , при  $r < r_+$ , и  $n_+ = 0$ , при  $r > r_+$  ( $U(r_+) + H = 0$ ) для спина по полю и  $n_- = (-2U)^{3/2}/6\pi^2$  для спина против поля. Сам потенциал  $U$  определяется уравнением Томаса–Ферми:

$$\Delta U = -4\pi(n_+ + n_-).$$

Отсылая за подробностями к работе [79], укажем, что полный спин атома  $S$  возрастает с полем по закону  $S = Zf(HZ^{-4/3})$  где  $f$  — некоторая универсальная функция. Рассмотренные эффекты важны в условиях поверхности нейтронных звезд, которые мы рассмотрим далее.

## 6.7. Пределы применимости МТФ. Эксперимент

Недостатком модели Томаса–Ферми является неверное описание электронной плотности на периферии ячейки и вблизи ядра ввиду нарушения там условий квазиклассичности. В работе [86] предложен способ устранения этого недостатка путем использования метода последовательных приближений при решении уравнений Томаса–Ферми с квантовыми поправками без разложения в ряд по параметру малости. Такой подход составляет основу квантово-статистической модели, в которой решение вблизи ядра быстро сходится, а на больших расстояниях от него имеет качественно правильное квантово-механическое поведение. Получающиеся формулы, однако, уже не имеют подобия по  $Z$ . Для каждого элемента численные расчеты надо проводить заново, а сами уравнения гораздо более трудны для численного счета. Предложен также и ряд других модификаций [23, 87–89] квазиклассической модели в окрестности ядра, отличающихся способом введения поправок. Однако при термодинамическом описании различие между этими моделями и моделью Томаса–Ферми с поправками заметно лишь вне области их формальной применимости, что объясняет предпочтительность для проведения конкретных расчетов более простой модели ТФП.

При использовании квазиклассического способа описания следует особо подчеркнуть специфические погрешности, вносимые самой ячейечной моделью. В этой модели все электронные корреляции автоматически ограничены размерами атомной ячейки и не могут поэтому превышать среднее расстояние между ядрами, а межъядерные корреляции отсутствуют. Данные обстоятельства очевидным образом ограничивают применимость модели Томаса–Ферми для описания плазмы в типичных для этого состояния вещества условиях, когда в сфере экранирования находится значительное количество ядер, корреляции между которыми дают основной вклад в дебаевскую поправку [90].

Поэтому, вопреки утверждению [90], эта модель не обладает дебаевским пределом в плазменной области. Более того, ее экстраполяционные свойства ухудшаются по мере разрежения плазмы [90], поскольку модель не учитывает ступенчатый характер термодинамических функций в газовой плазме — рис. 6.14. О неадекватности расчетов по модели Томаса–Ферми и квантово-механических расчетов по модели Хартри–Фока–Слэтера [91] в характерном плазменном диапазоне свидетельствует также рис. 6.15.

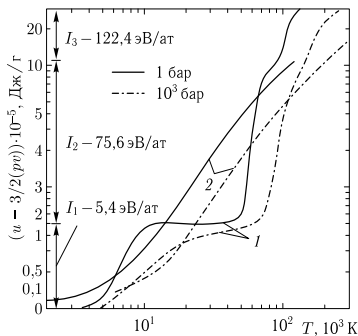


Рис. 6.14. Уравнение состояния плазмы лития [90]. Расчет: 1 — химическая модель, 2 — модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками.  $I_1$ ,  $I_2$ ,  $I_3$  — потенциалы последовательных ионизаций

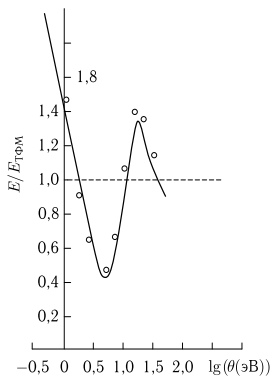


Рис. 6.15. Отношение энергии плазмы лития по модели Хартри–Фока–Слэтера [91] к энергии по модели ТФП [70, 73] при давлении  $p = 1$  кбар. Значки — расчет по химической модели

Эффекты ядерной корреляции могут быть существенны и в конденсированной фазе, поскольку ячеечная модель игнорирует отклонение реального объема ячеек от среднего за счет движения ядер, что справедливо лишь для упорядоченных систем. При значениях параметра неидеальности  $\Gamma \approx 100$ , характерных для конденсированного состояния и плотной плазмы, в уравнении состояния необходимо учитывать также движение ядер, вызывающее флуктуацию атомного объема. Для модели Томаса–Ферми оценка этого эффекта была проведена в работе [92], где на примере  $\text{SiO}_2$  показано, что в интервале значений  $1 < \Gamma < 100$  учет ядерного движения повышает давление на  $\approx 15\%$ .

В связи с большим распространением квазиклассической модели значительные усилия были потрачены на экспериментальную проверку условий ее применимости [93, 94]. Даваемые малостью безразмерных критериев физические условия ее применимости соответствуют экстремально высоким давлениям  $p \gg 300$  Мбар и температурам  $T \gg 10^5$  К, которые реализуются

в различных астрофизических объектах, но пока недоступны для техники эксперимента в земных условиях. Предельно достижимые в настоящее время измерения в области высоких давлений и температур осуществляется с помощью динамических методов, использующих технику мощных ударных волн [95–101]. Хотя данные ударноволновых экспериментов впрямую не соответствуют квантостатистическим условиям, они позволяют оценить экстраполяционные свойства квазиклассических моделей вне границы их формальной применимости, устанавливаемой [95, 102] малостью соответствующих безразмерных параметров. Результаты подобных построений показывают, что введение квантовых, обменных и корреляционных поправок (осцилляционные поправки не учитывались) улучшает экстраполяцию, которая в этом случае оказывается возможной, по мнению авторов [102], для нулевой температуры до давлений  $p \gtrsim 300$  Мбар, а при  $T \gtrsim 10^5$  К до  $p \approx 50$  Мбар. Вместе с тем две возможные интерпретации [95, 102] результатов сравнительных измерений не дают однозначного ответа на вопрос о предпочтительности того или иного варианта квазиклассической модели и находятся в противоречии с данными абсолютных измерений [96–98, 100]. Отметим также, что эксперименты по ударному сжатию сильно пористой меди при давлениях 10–20 Мбар и температурах до  $2 \cdot 10^5$  К [99] и сплошных веществ при давлениях до 160 Мбар [101] (рис. 6.17, см. также рис. 6.16) указывают на значительное влияние оболочечных эффектов в области, как приближенно считалось ранее, традиционно описывавшейся стандартной моделью Томаса–Ферми.

Приведенная на рис. 6.16 ударная адиабата Al [104, 105] демонстрирует качество описания теоретическими моделями данных по ударно-волновому сжатию плазмы в широкой области параметров вплоть до рекордных на сегодня давлений  $p \approx 4$  Гбар, полученных в ближней зоне подземного ядерного взрыва. Интересно, что при этих сверхвысоких давлениях удельная энергия плазмы достигает гигантских значений порядка  $1$  ГДж/см<sup>3</sup>, близких к плотности энергии ядерного вещества. В этом режиме сжатия, давление и энергия теплового излучения сравнима с давлением и температурой электронов и ионов. По-видимому, лишено большого смысла повышать давление ударного сжатия сверх указанных пределов, так как в этом случае доминирующей будет термодинамика фотонного газа, а не самого вещества.

В силу исходных упрощений квазиклассическая модель с квантовой и обменной поправками неприменима при низких давлениях, однако она дает [70, 73] разумное усреднение атомных объемов элементов по периодической системе. Качественное улучшение описания в области низких давлений, отражающее индивидуальность веществ, было достигнуто модельным объединением элементов квазиклассической и зонной теорий [106].

Полученный к настоящему времени большой объем термодинамической информации демонстрирует [65] (рис. 6.12) вызванное давлением сглаживание удельных атомных объемов химических элементов. Действительно, наблюдаемая при нормальных условиях  $p = 0$  (нижняя кривая рис. 6.12) резкая немонотонность зависимости  $v_0(Z)$  является проявлением квантового характера строения вещества. Это в полной мере находит отражение в структуре Периодической системы и химической реакционной способности элементов. Сжатие вещества приводит к «раздавливанию» и «размешиванию» электрон-

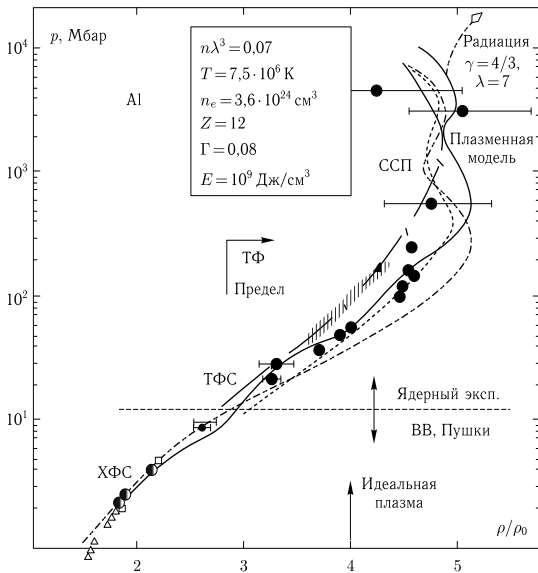


Рис. 6.16. Ударно-волновое сжатие алюминия до гигабарных давлений [103–105]

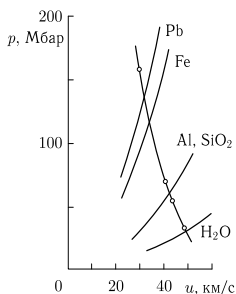


Рис. 6.17. Результаты измерений относительной сжимаемости веществ при сверхвысоких давлениях [101]. Значки — эксперимент, сплошные линии — расчет по ТФП. Немонотонное отличие данных эксперимента от расчета свидетельствует о заметном влиянии оболочечных эффектов

ных оболочек, так что элементы теряют свою химическую индивидуальность, а их поведение становится все более универсальным [23, 107]. Как показывает эксперимент [65], с ростом давления наблюдаемые осцилляции становятся все менее выраженными (кривые  $p = 1$  и  $10$  Мбар), подтверждая основную

идею квазиклассической модели (без учета оболочек) дефектов «упрощения» структуры и свойств вещества с ростом его сжатия [93, 94].

Подчеркнем, что сама модель Томаса–Ферми, ввиду отсутствия в ней учета сил сцепления, при нулевом давлении приводит к бесконечному радиусу атомной ячейки и только введение поправок дает конечную плотность вещества. В работе [70, 73] было отмечено, что с увеличением давления осцилляции атомного объема уменьшаются и приближаются к расчетам по модифицированным моделям Томаса–Ферми, хотя отчасти это объясняется тем, что при высоких давлениях сравнение проводилось с результатами экстраполяции [108] экспериментальных данных к самим квазиклассическим расчетам.

В действительности тенденция к упрощению свойств вещества нарушается при более высоких давлениях из-за наличия в атоме внутренних электронных оболочек. Как было установлено [23, 38], оболочечные эффекты могут быть качественно описаны в рамках квазиклассического приближения путем учета нерегулярной по  $\hbar^2$  поправки, соответствующей ошибочно отбрасываемой ранее осциллирующей части электронной плотности. При этом существенно, что оболочечные эффекты описываются уже в низшем квазиклассическом приближении для волновой функции и должны поэтому учитываться наряду с рассмотренными выше поправками. В соответствии с работой [109] оболочечные эффекты отражают нерегулярности характеристик вещества, обусловленные дискретным спектром энергии, и возникают в квазиклассической модели как результат интерференции волн де Бройля. Таким образом, квазиклассическая модель в ее современном варианте является значительно более содержательной, чем это ранее предполагалось. Оказывается, что эта модель не только описывает поведение электронов в тяжелых и сильно сжатых атомах, но и качественно воспроизводит внутреннюю оболочечную структуру атома [23] и дает в ряде случаев результаты, близкие к расчетам по более точным квантовомеханическим моделям, выгодно отличаясь от них простотой и наглядностью.

Учет оболочечных эффектов заметно изменяет уравнение состояния вещества, приводя в области высоких давлений (там, где данное приближение является оправданным) к появлению разрывов на кривой атомных объемов  $v(Z)$  [23]. При этом в уравнении состояния появляются характерные немонотонности, вызванные электронными фазовыми переходами при выдавливании энергетических уровней из дискретного спектра в непрерывный. Можно было бы ожидать, что при повышении температуры эти немонотонности будут сглажены под влиянием резонансных электронов. Тем не менее результаты проведенного в приближении центрального поля расчета [110] свидетельствуют (рис. 6.18) о заметном влиянии оболочечной структуры даже для сильно разогретого вещества. Значительный вклад оболочечных эффектов при гипермегабарных давлениях следует также из результатов квантовомеханических расчетов в приближении Хартри–Фока–Слэтера [23] и методом присоединенных плоских волн [111] (см. далее рис. 6.19 и 6.20). Данные эффекты предсказываются в широкой области параметров [23] и должны пропадать как мы обсуждали это (в гл. 1) при  $n \gg Z^4$  в области однородности, когда в непрерывный спектр переходят все энергетические уровни атома. Отметим

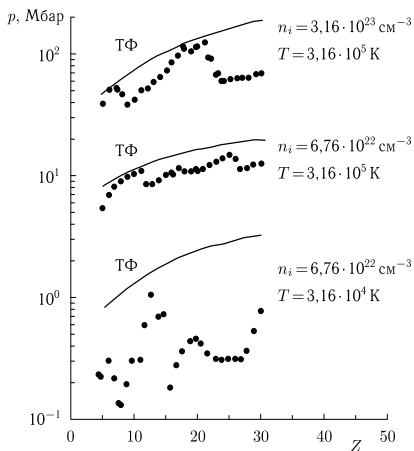


Рис. 6.18. Зависимость давления от атомного номера при фиксированной плотности и температуре [110]. Сплошные линии — расчет по модели Томаса–Ферми, точки — учет оболочечных эффектов в приближении центрального поля

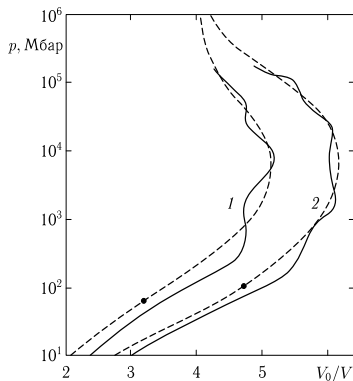


Рис. 6.19. Ударные адиабаты меди (1) и свинца (2) [110]. Сплошные линии — расчет по модели Хартри–Фока–Слэтера, штриховые — расчет по модели ТФП и интерполяция [102]

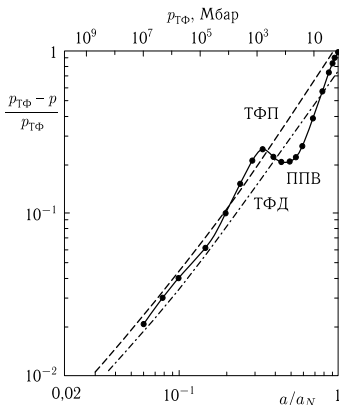


Рис. 6.20. Уравнение состояния алюминия ( $T = 0\text{ K}$ ) [111]. Расчет: ТФД — модель Томаса–Ферми–Дирака, ТФП — модель Томаса–Ферми с квантовой и обменной поправками, ППВ — модель присоединенных плоских волн,  $a$  — параметр решетки

в этой связи, что вопрос об асимптотическом поведении квазиклассической модели не является тривиальным, так как показано в [112], что эта модель соответствует точному решению уравнения Шредингера лишь при  $Z \rightarrow \infty$ , но не в пределе больших плотностей и давлений.

Таким образом, в настоящее время вопрос о границах применимости квазиклассической модели в значительной степени остается открытым, а характер поведения вещества в области  $p > 300$  Мбар оказывается более разнообразным, чем это предполагалось ранее на основании упрощенных представлений [64, 70, 73]. Экспериментальная проверка предсказаний оболочечной квазиклассической модели, как и поиск соответствующих фазовых переходов, является в настоящее время наиболее интересной задачей физики сверхвысоких давлений, для решения которой понадобится, по-видимому, особая экспериментальная техника, использующая мощные лазеры [113, 114], электронные пучки [115] или подземные ядерные взрывы [96–98]. В этой связи значительный интерес представляет воспроизведение оболочечных эффектов в уравнении состояния прямыми квантово-механическими методами, обоснованию которых посвящены гл. 3, 7.

### Список литературы

1. Попл Д. А. Квантово-химические модели // УФН. — 2002. — Т. 172, № 3. — С. 349.
2. Коэн М. Л., Хейне Ф., Филлипс Д. К. Квантовая механика вещества // УФН. — 1984. — Т. 142, № 2. — С. 309.

3. Кон В. Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // УФН. — 2002. — Т. 172, № 3. — С. 336.
4. Максимов Е. Г., Магницкая М. В., Фортвов В. Е. Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях // УФН. — 2005. — Т. 175, № 8. — С. 793.
5. Roothaan C. C. J. New Developments in Molecular Orbital Theory // Rev. Mod. Phys. — 1951. — V. 23, No. 2. — P. 69.
6. Pople J. A., Nesbet R. K. Self-Consistent Orbitals for Radicals // J. Chem. Phys. — 1954. — V. 22. — P. 571.
7. Parr R. G. A Method for Estimating Electronic Repulsion Integrals Over LCAO MO'S in Complex Unsaturated Molecules // J. Chem. Phys. — 1952. — V. 20. — P. 1499.
8. Pariser R., Parr R. G. A Semi-Empirical Theory of the Electronic Spectra and Electronic Structure of Complex Unsaturated Molecules. I. // J. Chem. Phys. — 1953. — V. 21, No. 3. — P. 466.
9. Pariser R., Parr R. G. A Semi-Empirical Theory of the Electronic Spectra and Electronic Structure of Complex Unsaturated Molecules. II // J. Chem. Phys. — 1953. — V. 21, No. 5. — P. 767.
10. Pople J. A. // Trans. Faraday Soc. — 1953. — V. 49. — P. 1375.
11. Pople J. A., Santry D. P., Segal G. A. Approximate Self-Consistent Molecular Orbital Theory. I. Invariant Procedures // J. Chem. Phys. — 1965. — V. 43, No. 10. — P. S129.
12. Pople J. A., Segal G. A. Approximate Self-Consistent Molecular Orbital Theory. II. Calculations with Complete Neglect of Differential Overlap // J. Chem. Phys. — 1965. — V. 43, No. 10. — P. S136.
13. Boys S. F. // Proc. R. Soc. London Ser. A. — 1950. — V. 200. — P. 542.
14. Pople J. A., Hehre W. J. // Comput. Phys. — 1978. — V. 11. — P. 161.
15. Hariharan P. C., Pople J. A. // Theor. Chim. Ada. — 1973. — V. 28. — P. 213.
16. Self-consistent molecular orbital methods. XXIII. A polarization-type basis set for second-row elements / Francl M. M., Pietro W. J., Hehre W. J. et al. // J. Chem. Phys. — 1982. — V. 77, No. 7. — P. 3654.
17. Møller C., Plesset M. S. Note on an Approximation Treatment for Many-Electron Systems // Phys. Rev. — 1934. — V. 46, No. 7. — P. 618.
18. Krishnan R., Pople J. A. // Int. X Quantum Chem. — 1978. — V. 14. — P. 91.
19. Krishnan R., Frisch M. J., Pople J. A. Contribution of triple substitutions to the electron correlation energy in fourth order perturbation theory // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 72, No. 7. — P. 4244.
20. Thomas L. H. The calculation of atomic fields // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — V. 23. — 1927. — P. 542.
21. Fermi E. // Rend. Accad. Nazl. Lincei. — 1927. — V. 6. — P. 602.
22. Haensel P., Potekhin A. Y., Yakovlev D. G. Neutron stars 1: Equation of state and structure. — N.Y.: Springer, 2007. — V. 326 of Astrophysics and Space Science Library.
23. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В. Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3.
24. Бушман А., Фортвов В. Модели уравнения состояния вещества // УФН. — 1983. — Т. 140, № 2. — С. 177.
25. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц. — М.: Атомиздат, 1963. — [D.A. Kirzhnits, Field-Theoretical Methods in Many-body Systems, Oxford, Pergamon Press, 1967.]

26. Гомбаш П. Статистическая теория атомных ядер // УФН. — 1953. — Т. 49, № 3. — С. 385.
27. Компанеев А. С. // ЖЭТФ. — 1953. — Т. 25. — С. 540.
28. Компанеев А. С. // ЖЭТФ. — 1953. — Т. 26. — С. 153.
29. Бете Г. А. Теория ядерной материи. — М.: Наука, 1973.
30. Киржниц Д. А. Эстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 3. — С. 489.
31. Абрикосов А. А. Некоторые свойства сильно сжатого вещества. I // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 39, № 6. — С. 1797.
32. Абрикосов А. А. К теории сильно сжатого вещества. II // ЖЭТФ. — 1961. — Т. 41, № 2. — С. 569.
33. Гомбаш П. Статистическая теория атома и ее применения. — М.: ИЛ, 1956.
34. Гадияк Г. В., Чигишева Т. М. // Численные методы механики сплошной среды. — Новосибирск, 1975. — Т. 7. — С. 43.
35. Гадияк Г. В., Лозовик Ю. Е. // Численные методы механики сплошной среды. — Новосибирск, 1975.
36. Гадияк Г. В., Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е. Коллективные уровни в тяжелых атомах // Письма в ЖЭТФ. — 1975. — Т. 21, № 2. — С. 135.
37. Гадияк Г. В., Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е. // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69. — С. 122.
38. Киржниц Д. А., Шпатаковская Г. В. // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 62. — С. 2082.
39. Шпатаковская Г. В. Канд. диссертация. — ФИАН СССР, 1974.
40. Hostler L., Pratt R. H. Coulomb Green's Function in Closed Form // Phys. Rev. Lett. — 1963. — V. 10, No. 11. — P. 469.
41. Golden S. Statistical Theory of Many-Electron Systems. General Considerations Pertaining to the Thomas-Fermi Theory // Phys. Rev. — 1957. — V. 105, No. 2. — P. 604.
42. Golden S. Statistical Theory of Many-Electron Systems. Discrete Bases of Representation // Phys. Rev. — 1957. — V. 107, No. 5. — P. 1283.
43. Киржниц Д. А., Шпатаковская Г. В. // ЖЭТФ. — 1974. — Т. 66. — С. 1828.
44. Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Препринт ИПМ АН СССР N13. — М.: ИПМ АН СССР, 1974.
45. Zink J. W. Shell Structure and the Thomas-Fermi Equation of State // Phys. Rev. — 1968. — V. 176, No. 1. — P. 279.
46. Rozsnyai B. F. Relativistic Hartree-Fock-Slater Calculations for Arbitrary Temperature and Matter Density // Phys. Rev. A. — 1972. — V. 5, No. 3. — P. 1137.
47. Киржниц Д. А. К статистической теории многих частиц // Тр. ФИАН СССР. — 1961. — Т. 16. — С. 3.
48. Киржниц Д. А. Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми // ЖЭТФ. — 1957. — Т. 32. — С. 115.
49. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Препринт ИПМ АН СССР N55. — М.: ИПМ АН СССР, 1961.
50. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Кривые холодного сжатия при больших давлениях // Физика твердого тела. — 1971. — Т. 12. — С. 2314.
51. Шпатаковская Г. В. Дипломная работа. — МГУ, 1969.
52. Фрадкин Е. С. // ЖЭТФ. — 1959. — Т. 36. — С. 1533.
53. Tietz T. Approximate Analytic Solution of the Thomas-Fermi Equation for Atoms // J. Chem. Phys. — 1954. — V. 22, No. 12. — P. 2094.
54. Hartree D., Hartree W. // Proc. Roy. Soc. — 1935. — V. 149. — P. 210.

55. International Tables for X-ray Crystallography. — Kynoch Press, 1962. — V. 3.
56. *Thomas L. H., Umeda K.* Atomic Scattering Factors Calculated from the TFD Atomic Model // *J. Chem. Phys.* — 1957. — V. 26, No. 2. — P. 293.
57. *Von Barth U., Hedin L.* A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i // *Journal of Physics C: Solid State Physics.* — 1972. — V. 5, No. 13. — P. 1629.
58. *Шпатаковская Г. В.* // Кр. сообщ. физ. (ФИАН СССР). — 1973. — № 5,10.
59. *Компанеев А. С., Павловский Е. С.* // ЖЭТФ. — 1956. — Т. 31. — С. 427.
60. *Enstrom J. E.* Solution of the Thomas-Fermi Model with Quantum Corrections // *Phys. Rev. A.* — 1971. — V. 4, No. 2. — P. 460.
61. *Schey H. M., Schwartz J. L.* Quantum Corrections in the Thomas-Fermi Model // *Phys. Rev.* — 1965. — V. 137, No. 3A. — P. A709.
62. *Зельдович Я. Б., Новиков И. Д.* Теория тяготения и эволюции звезд. — М.: Наука, 1971.
63. *Latter R.* Thomas — Fermi Model of Compressed Atoms // *J. Chem. Phys.* — 1956. — V. 24, No. 2. — P. 280.
64. *Latter R.* Temperature Behavior of the Thomas-Fermi Statistical Model for Atoms // *Phys. Rev.* — 1955. — V. 99, No. 6. — P. 1854.
65. *Альтшулер Л. В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. — 1965. — Т. 85, № 2. — С. 197.
66. *Cowan R. D., Ashkin J.* Extension of the Thomas-Fermi-Dirac Statistical Theory of the Atom to Finite Temperatures // *Phys. Rev.* — 1957. — V. 105, No. 1. — P. 144.
67. *Киржниц Д. А.* О границе применимости квазиклассического уравнения состояния вещества // ЖЭТФ. — 1958. — Т. 35, № 6(12). — С. 1545.
68. *Калиткин Н. Н.* // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 38. — С. 1534.
69. *Калиткин Н. Н.* Препринт ИПМ АН СССР. — М.: ИПМ АН СССР, 1968.
70. *Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В.* Препринт ИПМ АН СССР N35. — М.: ИПМ АН СССР, 1975.
71. *Auluck F. S., Jain A.* Thomas-Fermi Equation of State with Exchange, Correlation, and Quantum Corrections // *Phys. Rev. B.* — 1970. — V. 1, No. 2. — P. 931.
72. *McCaughy S. I.* Preprint UCRL-14364. — Livermore, Calif., 1965.
73. *Калиткин Н. Н.* Докт. диссертация. — ИПМ АН СССР, 1975.
74. *Фейнберг Е. Л.* // ЖЭТФ. — 1935. — Т. 5. — С. 519.
75. *Slater J. C., Krutter H. M.* The Thomas-Fermi Method for Metals // *Phys. Rev.* — 1935. — V. 47, No. 7. — P. 559.
76. Развитие в России динамических методов исследований высоких давлений / *Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Урлин В. Д. и др.* // УФН. — 1999. — Т. 169, № 3. — С. 323.
77. *Фейнберг Е. Л.* // ЖЭТФ. — 1935. — Т. 5. — С. 926.
78. *Шпатаковская Г. В.* Оболочечные эффекты в уравнении состояния холодного сильносжатого вещества. Препринт ИПМ АН СССР № 54. — М.: ИПМ АН СССР, 1975.
79. *Labzowsky L., Lozovik Y.* Spin rearrangement of atoms in strong magnetic fields // *Phys. Lett. A.* — 1972. — V. 40, No. 4. — P. 281.
80. *Кадомцев Б. Б.* // ЖЭТФ. — 1970. — Т. 58. — С. 1765.
81. *Кадомцев Б. Б., Кудряцев В. С.* Атомы в сверхсильном магнитном поле // Письма в ЖЭТФ. — 1971. — Т. 13, № 1. — С. 61.
82. *Cohen R., Lodenquai J., Ruderman M.* Atoms in Superstrong Magnetic Fields // *Phys. Rev. Lett.* — 1970. — V. 25, No. 7. — P. 467.

83. *Ruderman M.* Matter in Superstrong Magnetic Fields: The Surface of a Neutron Star // *Phys. Rev. Lett.* — 1971. — V. 27, No. 19. — P. 1306.
84. *Constantinescu D. H., Rehak P.* Ground State of Atoms and Molecules in a Superstrong Magnetic Field // *Phys. Rev. D.* — 1973. — V. 8, No. 6. — P. 1693.
85. *Mueller R. O., Rau A. R. P., Spruch L.* Simple Atomic Model and its Associated Wave Function // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8, No. 3. — P. 1186.
86. *Фортов В. Е., Мусянков С. И., Якушев В. В., Дремин А. Н.* // ТВТ. — 1974. — Т. 12. — С. 957.
87. *More R. M.* Quantum-statistical model for high-density matter // *Phys. Rev. A.* — 1979. — V. 19, No. 3. — P. 1234.
88. *Perrot F.* Zero-temperature equation of state of metals in the statistical model with density gradient correction // *Physica A.* — 1979. — V. 98, No. 3. — P. 555.
89. *Perrot F.* Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations // *Phys. Rev. A.* — 1979. — V. 20, No. 2. — P. 586.
90. *Иосилевский И. Л., Грязнов В. К.* О сравнительной точности термодинамического описания свойств газовой плазмы в приближениях Томаса–Ферми и Саха // ТВТ. — 1981. — Т. 19. — С. 1121.
91. Препринт ИПМ АН СССР № 172 / *Никифиров А. Ф., Новиков В. Г., Орлов Ю. Н., Уваров В. Б.* — М., 1979.
92. *More R. M., Skupsky S.* Nuclear-motion corrections to the Thomas-Fermi equation of state for high-density matter // *Phys. Rev. A.* — 1976. — V. 14, No. 1. — P. 474.
93. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
94. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
95. *Трунин Р. Ф., Подурец М. А., Симаков Г. В. и др.* // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 62. — С. 1043.
96. *Ragan C. E., Silbert M. G., Diven B. C.* Shock compression of molybdenum to 2.0 TPa by means of a nuclear explosion // *J. Appl. Phys.* — 1977. — V. 48, No. 7. — P. 2860.
97. *Ragan C. E.* Ultrahigh-pressure shock-wave experiments // *Phys. Rev. A.* — 1980. — V. 21, No. 2. — P. 458.
98. *Ragan C. E.* Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // *Phys. Rev. A.* — 1982. — V. 25, No. 6. — P. 3360.
99. Детонация / *Зубарев В. Н., Подурец М. А. и др.* — Черноголовка, Моск. обл.: ОИХФ АН СССР, 1978.
100. Ударная сжимаемость алюминия при давлении 10 Мбар / *Волков Л. П., Волошин Н. П., Владимиров А. С. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1980. — Т. 31, № 11. — С. 623.
101. Ударная сжимаемость свинца, кварцита, алюминия, воды при давлении 100 Мбар / *Аврорин Е., Водолага Б., Волков Л. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1980. — Т. 31, № 12. — С. 727.
102. *Альтшулер Л. В., Калиткин Н. Е., Кузьмина Л. В., Чекин Б. С.* // ЖЭТФ. — 1977. — Т. 72. — С. 317.
103. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества / *Аврорин Е., Водолага Б., Симоненко В., Фортов В.* // УФН. — 1993. — Т. 163, № 5. — С. 1.
104. Ударная сжимаемость алюминия при давлениях  $P > 1$  Гбар / *Владимиров А. С., Волошин Н. П., Ногин В. Н. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1984. — Т. 39, № 2. — С. 69.

105. Аврорин Е. Н., Симоненко В. А., Шибаршов Л. И. Физические исследования при ядерных взрывах // УФН. — 2006. — Т. 176, № 4. — С. 449.
106. Liberman D. A. Self-consistent field model for condensed matter // Phys. Rev. B. — 1979. — V. 20, No. 12. — P. 4981.
107. Киржниц Д. Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489.
108. Калиткин Н. Н., Говорухина И. А. // ФТТ. — 1965. — Т. 7. — С. 355.
109. Cook M. A., Keyes R. T., Udy L. L. Propagation Characteristics of Detonation-Generated Plasmas // J. Appl. Phys. — 1959. — V. 30, No. 12. — P. 1881.
110. Lee C. M., Thorsos E. I. Properties of matter at high pressures and temperatures // Phys. Rev. A. — 1978. — V. 17, No. 6. — P. 2073.
111. McMahan A. K., Ross M. // High Pressure Science and Technology / Ed. by K. D. Timmerhaus, M. S. Barber. — N.Y.: Plenum Press, 1979. — V. 2. — P. 920.
112. Lieb E. H., Simon B. Thomas-Fermi Theory Revisited // Phys. Rev. Lett. — 1973. — V. 31, No. 11. — P. 681.
113. Ultrahigh-Pressure Laser-Driven Shock-Wave Experiments in Aluminum / Trainor R. J., Shaner J. W., Auerbach J. M., Holmes N. C. // Phys. Rev. Lett. — 1979. — V. 42, No. 17. — P. 1154.
114. Veerer L. R., Solem J. C., Lieber A. J. Impedance-match experiments using laser-driven shock waves // Appl. Phys. Lett. — 1979. — V. 35, No. 10. — P. 761.
115. Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кальдиरोлы, Г. Кнопфеля. — М.: Мир, 1974.

## МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

## 7.1. Метод функционала плотности

Выражение для энергии в МТФ при  $T = 0$  может быть представлено в виде явного функционала плотности [1]:

$$E\{n\} = T[n] + E_e[n] + E_i[n], \quad (7.1)$$

$$T[n] \sim \int dx n^{5/3}(\mathbf{x}). \quad (7.2)$$

Минимум функционала  $E - \mu \int dx n$  по  $n$  ведет к уравнению Томаса–Ферми (гл. 6) и определяет энергию основного состояния системы и соответствующее распределение плотности. Выходя за рамки МТФ и принимая во внимание соответствующие добавки, мы, как легко видеть, продолжаем иметь дело с функционалом (7.1), но только вид функционала (7.2) становится более сложным. В частности, учет квантовых эффектов ведет к тому, что вместо квазигомогенного функционала мы получаем функционал, зависящий от производных  $n$ . Неудивительно поэтому, что имеет силу следующее утверждение: при точной постановке задачи многих тел (многочастичное уравнение Шредингера) энергия системы выражается в виде функционала (7.1) с однозначным универсальным функционалом  $E_k$  общего вида, причем минимум функционала  $E - \mu \int dx n$  дает энергию и распределение плотности в основном состоянии системы. Это утверждение было обосновано с помощью теории возмущений Марчем и Мэрреем [2] и доказано как строгая теорема Хозенбергом и Коном [3].

Метод функционала плотности представляет собой точную квантовомеханическую теорию для системы взаимодействующих квантовых частиц во внешнем потенциале  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ . Сам метод основан на двух строго доказанных теоремах [3].

1. Для любой системы взаимодействующих частиц во внешнем потенциале  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ , потенциал  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  с точностью до произвольной постоянной определяется электронной плотностью в основном состоянии  $n_0(\mathbf{r})$ .
2. Энергия невырожденного основного состояния системы для любого внешнего потенциала  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  является функционалом электронной плотности  $E[n(\mathbf{r})]$ . Основное состояние системы является минимумом этого функционала, который достигается при плотности, соответствующей основному состоянию системы  $n_0(\mathbf{r})$ .

Из первой теоремы следует, что гамильтониан системы с точностью до постоянной величины определяется электронной плотностью основного состояния  $n_0(\mathbf{r})$ ; отсюда следует, что определены многочастичные волновые

функции для всех состояний (основного и возбужденных). Таким образом, все свойства системы полностью определены, если известна электронная плотность основного состояния  $n_0(\mathbf{r})$ . Из второй теоремы следует, что при известном функционале  $E[n]$  можно определить плотность и энергию основного состояния.

Функционал энергии в формулировке [3] можно записать следующим образом:

$$E_{\text{HK}}[n] = T[n] + E_{\text{int}}[n] + \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{II}} \equiv F_{\text{HK}}[n] + \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{II}}, \quad (7.3)$$

где  $E_{\text{II}}$  — энергия взаимодействия ядер. Функционал  $F_{\text{HK}}[n]$  включает в себя кинетическую и потенциальную энергию системы взаимодействующих электронов:

$$F_{\text{HK}}[n] = T[n] + E_{\text{int}}[n]. \quad (7.4)$$

Минимум функционала (7.3) определяет энергию системы в основном состоянии и ее электронную плотность. Следует отметить, что (7.3) не несет никакой информации о возбужденных состояниях системы.

Прямая минимизация функционала  $E_{\text{HK}}[n]$  наталкивается на определенные трудности. Альтернативный способ нахождения минимума функционала  $E[n]$  был предложен в работах [4, 5], при этом используется выражение для энергии через многочастичную волновую функцию  $\Psi$ :

$$E = \langle \Psi | \bar{T} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \bar{V}_{\text{int}} | \Psi \rangle + \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{II}}. \quad (7.5)$$

Минимизация производится в два этапа. Сначала энергия минимизируется на классе многочастичных волновых функций, которые дают одну и ту же электронную плотность  $n(\mathbf{r})$ :

$$E_{\text{LL}}[n] = \min_{\Psi \rightarrow n(\mathbf{r})} [\langle \Psi | \bar{T} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \bar{V}_{\text{int}} | \Psi \rangle] + \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{II}} \equiv F_{\text{LL}}[n] + \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{II}}. \quad (7.6)$$

Здесь

$$F_{\text{LL}}[n] = \min_{\Psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \Psi | \bar{T} + V_{\text{int}} | \Psi \rangle \quad (7.7)$$

— функционал электронной плотности, не зависящий явно от  $V_{\text{ext}}$ . На втором этапе ищется минимум функционала  $E_{\text{LL}}[n]$  по электронной плотности  $n(\mathbf{r})$ :

$$E = \min_{n(\mathbf{r})} E_{\text{LL}}[n]. \quad (7.8)$$

Такая двухступенчатая процедура применима также для вырожденного основного состояния, в этом случае минимум достигается при любой электронной плотности, соответствующей основному состоянию.

Теория функционала плотности допускает обобщение на случай конечных температур [6]. Функционал энергии от электронной плотности при этом

заменяется на функционал большого термодинамического потенциала  $\Omega$  от оператора плотности  $\hat{\rho}$ :

$$\Omega[\hat{\rho}] = \text{Sp} \left[ \hat{\rho}(\hat{H} - \mu\hat{N}) + \frac{1}{\beta} \ln \hat{\rho} \right]. \quad (7.9)$$

Минимум этого функционала совпадает с термодинамически равновесным выражением для большого термодинамического потенциала:

$$\Omega = \Omega[\hat{\rho}_0] = -\ln \text{Sp} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}, \quad (7.10)$$

где  $\hat{\rho}_0$  — оператор плотности в большом каноническом ансамбле:

$$\hat{\rho}_0 = \frac{e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}}{\text{Sp} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}}. \quad (7.11)$$

Теорема Мермина [6] утверждает, что не только энергия, но также и все термодинамические функции, в частности, энтропия и теплоемкость, являются функционалами равновесной плотности.

Метод функционала плотности имеет строгое теоретическое обоснование, однако установление связи между электронной плотностью основного состояния и свойствами вещества является нетривиальной задачей. Основная проблема, которая возникает на этом пути — это отсутствие в общем случае прямой связи между кинетической энергией и функцией электронной плотности. Для решения этой проблемы в работе [7] было высказано предположение, что основное состояние взаимодействующей системы частиц совпадает с основным состоянием эквивалентной системы невзаимодействующих частиц, а взаимодействие можно учесть посредством так называемого обменно-корреляционного функционала, зависящего от электронной плотности. Задача в такой формулировке может быть решена численными методами с точностью, определяемой выражением для обменно-корреляционного функционала. Этот прием оказался весьма успешным, и все существующие методы расчета на основе метода функционала плотности используют это приближение. Разработанные в настоящее время обменно-корреляционные функционалы хорошо описывают полупроводники II–V группы, простые и переходные металлы, изоляторы, например, алмаз, NaCl и молекулы с ковалентной или ионной связью. Таким образом, подход Кона–Шэма [7] является очень важным шагом на пути построения методов расчета различных свойств многоэлектронных сильно взаимодействующих систем.

Функционал энергии  $E[n]$  в приближении Кона–Шэма записывается следующим образом:

$$E_{\text{KS}} = T_s[n] + \int d\mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + E_{\text{Hartree}}[n] + E_{\text{II}} + E_{\text{xc}}[n], \quad (7.12)$$

где электронная плотность определяется выражением

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} n(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\psi_i^{\sigma}(\mathbf{r})|^2; \quad (7.13)$$

кинетическая энергия системы невзаимодействующих частиц имеет вид

$$T_s = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N^{\sigma}} \langle \psi_i^{\sigma} | \nabla^2 | \psi_i^{\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N^{\sigma}} |\nabla \psi_i^{\sigma}|^2, \quad (7.14)$$

а кулоновская энергия взаимодействия электронов

$$E_{\text{Hartree}}[n] = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (7.15)$$

Здесь  $\sigma$  — суммарная проекция спина системы,  $N^{\sigma}$  — число состояний для заданной проекции спина  $\sigma$ , характеризующихся волновыми функциями  $\psi_i^{\sigma}(\mathbf{r})$  и собственными значениями энергии  $\varepsilon_i^{\sigma}$ .

Обменно-корреляционный функционал содержит многочастичные обменные и корреляционные эффекты; помимо этого, в нем содержится часть функционала кинетической энергии. Другими словами, обменно-корреляционный функционал представляет собой разность между кинетической энергией и энергией взаимодействия электронов в реальной взаимодействующей многочастичной системе и в фиктивной системе невзаимодействующих частиц, в которой электрон-электронное взаимодействие заменено на энергию Хартри:

$$E_{\text{xc}}[n] = \langle \hat{T} \rangle - T_s[n] + \langle \hat{V}_{\text{int}} \rangle - E_{\text{Hartree}}[n]. \quad (7.16)$$

Уравнения для определения волновых функций  $\psi_i^{\sigma}(\mathbf{r})$  и собственных значений энергии  $\varepsilon_i^{\sigma}$  можно получить из условия минимума функционала  $E_{\text{KS}}[n]$  при условии ортонормированности системы функций  $\langle \psi_i^{\sigma} | \psi_j^{\sigma'} \rangle = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'}$  [7]:

$$(H_{\text{KS}}^{\sigma} - \varepsilon_i^{\sigma}) \psi_i^{\sigma}(\mathbf{r}) = 0, \quad (7.17)$$

$$H_{\text{KS}}^{\sigma}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{KS}}^{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (7.18)$$

$$V_{\text{KS}}^{\sigma}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{\text{Hartree}}}{\delta n(\mathbf{r}, \sigma)} + \frac{\delta E_{\text{xc}}}{\delta n(\mathbf{r}, \sigma)} = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_{\text{Hartree}}(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}^{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (7.19)$$

Уравнения (7.17)–(7.19) называются уравнениями Кона–Шэма. Формально это система уравнений для невзаимодействующих частиц в самосогласованном потенциале  $V_{\text{KS}}^{\sigma}(\mathbf{r})$ . При известном точном выражении для обменно-корреляционного функционала  $E_{\text{xc}}[n]$  решение системы (7.17)–(7.19) дает точные значения энергии и электронной плотности основного состояния.

Обменно-корреляционный функционал  $E_{\text{xc}}[n]$  может быть с хорошей точностью аппроксимирован локальным или почти локальным функционалом плотности (LDA):

$$E_{\text{xc}}[n] = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \varepsilon_{\text{xc}}([n], \mathbf{r}), \quad (7.20)$$

где  $\varepsilon_{\text{xc}}([n], \mathbf{r})$  — энергия на один электрон в точке  $\mathbf{r}$ , зависящая только от плотности  $n(\mathbf{r}, \sigma)$  в некоторой окрестности точки  $\mathbf{r}$ . Существуют также выражения для  $E_{\text{xc}}[n]$ , в которых  $\varepsilon_{\text{xc}}$  зависит не только от электронной плотности  $n$ , но и от ее градиентов,

$$E_{\text{xc}}^{\text{GGA}} = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \varepsilon_{\text{xc}}([n], |\nabla n(\mathbf{r})|, \mathbf{r}), \quad (7.21)$$

это так называемое обобщенно-градиентное приближение [8]. Следует отметить, что уточнение LDA-приближения не всегда приводит к улучшению результатов моделирования [9]. Кроме того, описание обменно-корреляционных эффектов с помощью обменно-корреляционных функционалов в приближении LDA и GGA несправедливо для систем, в которых электронная плотность  $n(\mathbf{r})$  не является медленно меняющейся функцией. В частности, такими системами являются электронный вигнеровский кристалл, слабо перекрывающиеся системы с ван-дер-ваальсовым взаимодействием между ними, поверхность вещества, граничащего с вакуумом [10]. Теоретически, однако, такие обменно-корреляционные функционалы могут быть построены.

Уравнения Кона–Шэма (7.17) для нахождения основного состояния системы решаются различными способами. Ниже перечислены наиболее распространенные из них.

Наиболее естественным базисом для разложения волновых функций в уравнениях Кона–Шэма является базис из плоских волн. В этом базисе хорошо описываются почти свободные электроны, кроме того, плоские волны очень удобны для расчета зонной структуры вещества. Для описания электронов внутренних оболочек используются различные псевдопотенциалы, как эмпирические, так и теоретические [11, 12]. Метод плоских волн нашел широкое применение в квантовых молекулярно-динамических расчетах [13].

Другой подход состоит в построении волновых функций многоэлектронной системы посредством комбинирования волновых функций отдельных атомов, так называемый метод локализованных орбиталей, или сильной связи. Существует множество разновидностей этого подхода, наиболее известным из которых является метод линейной комбинации атомных орбиталей [14]. Метод сильной связи является наиболее простым и быстрым методом расчета зонной структуры вещества, и на его основе построены численные подходы, для которых время моделирования зависит от числа частиц линейно. Также этот метод является основой более сложных методов, например, линейной комбинации маффин-тин орбиталей [15].

Наконец, существует подход, объединяющий достоинства двух предыдущих, так называемый метод присоединенных функций [16]. Для внутренних оболочек атома используется метод локализованных орбиталей, при этом обычно решаются сферически-симметричные уравнения Кона–Шэма, Шредингера или Дирака. Для области пространства между атомами решение находится с помощью разложения по базисным функциям (плоским волнам). Такой метод расчета чаще всего используется для так называемых полноэлектронных вычислений, когда учитываются все электроны атома; с другой стороны, этот метод является наиболее трудоемким.

Расчет термодинамических функций с помощью метода функционала плотности производится следующим образом. Наиболее просто вычисляется полная энергия системы электронов, при  $T = 0$  можно также вычислить давление,  $p = -dE/dV$ . При ненулевой температуре в самосогласованном расчете используют числа заполнения, пропорциональные функциям Ферми–Дирака:

$$f(\varepsilon, \rho, T) = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon - \mu(\rho, T))/T]}, \quad (7.22)$$

где  $\mu$  — химический потенциал системы, определяемый из условия электронейтральности. При известных числах заполнения можно вычислить конфигурационную энтропию [31] и свободную энергию системы и определить все необходимые термодинамические параметры.

Поразительная эффективность метода функционала электронной плотности открыла широкие возможности применения для решения химических, физических, биологических, ядернофизических проблем.

Подробное их описание читатель может найти в монографиях [32–34], а также в сборнике лекций [35].

Следуя работе [36], перечислим лишь некоторые из направлений развития этого метода.

- Спин-поляризованные системы — МФП с учетом спина.
- Системы с вырожденными основными состояниями.
- Многокомпонентные системы (электронно-дырочные капли ядра).
- Статистические ансамбли для вырожденных основных состояний.
- Свободная энергия при конечных температурах.
- Квазиравновесные ансамбли для возбужденных состояний.
- Релятивистские электроны, астрофизика.
- Функционалы, зависящие от тока.
- Явления, зависящие от времени, возбужденные состояния.
- Бозоны (взамен фермионов).
- Комбинация ТФП с методом молекулярной динамики или Монте–Карло (особенно полезна для определения геометрических структур). (Метод Кара–Парринелло).
- Комбинация LDA с хаббардовским параметром.
- Свойства сжатой ядерной материи и много других научных направлений.

Отметим лишь несколько примеров применения МФП, близких к теме нашей монографии [37].

## 7.2. Атомные и молекулярные структуры

В таблице 7.1 [37] приведены экспериментальные данные по полной энергии легких атомов и отклонения от эксперимента полных энергий, рассчитанных в приближении ХФ ( $\Delta E_{\text{ХФ}}$ ), а также в рамках функционала локальной спиновой плотности без учета ( $\Delta E_{\text{LSD}}$ ) и с учетом ( $\Delta E_{\text{LSD-SIC}}$ ) поправки на остаточное самодействие. Данные приведены для двух вариантов поправки: зависящей только от орбитальных плотностей ( $\Delta E_{\text{LSD-SIC}}^{(1)}$ ) и зависящей еще и от углового момента ( $\Delta E_{\text{LSD-SIC}}^{(2)}$ ).

Из таблицы 7.1 [37] видно, что значения полных энергии атомов в приближении ХФ больше, чем экспериментальные. В приближении LSD они еще больше, с погрешностью, примерно вдвое превышающей погрешность приближения ХФ. Учет поправки на остаточное самодействие приводит к энергиям ниже экспериментальных, но в большинстве случаев лежащим к ним ближе,

Таблица 7.1. Отклонения теоретически полученных полных энергий легких атомов от суммы экспериментальных потенциалов ионизации, скорректированной на те эффекты, которые не учитывались в расчетах (релятивизм и т. п.) (обозначения см. работу [37])

Z	Атом	$E_{\text{экс}}$	$\Delta E_{\text{ХФ}}$	$\Delta E_{\text{LSD}}$	$\Delta E_{\text{LSD-SIC}}^{(1)}$	$\Delta E_{\text{LSD-SIC}}^{(2)}$
2	He	-79,0	+1,1	+ 1,9	0,4	-0,4
3	Li	-203,5	+ 1,3	+3,7	-0,7	-0,7
4	Be	-399,1	+2,6	+6,1	-0,7	-0,7
5	B	-670,8	+3,4	+8,3	-1,2	-0,7
6	C	-1029,7	+4,2	—	-2,3	-0,9
7	N	-1485,3	+5,0	+ 12,6	-3,6	-1,1
8	O	-2042,5	+6,9	—	-5,1	-1,2
9	F	-2713,5	+8,6	+16,9	-7,2	-1,7
10	Ne	-3508,1	+10,3	+19,2	-9,5	-2,1
11	Na	-4414,7	+10,5	+22,1	-11,4	-2,7
12	Mg	-5443,1	+ 11,6	+24,8	-13,3	-3,3
13	Al	-6594,0	+12,5	+28,0	-14,8	-3,2
14	Si	-7873,2	+13,5	—	-16,3	-3,2
15	P	-9285,1	+14,1	+34,0	-18,6	-3,3
16	S	-10832,3	+ 16,2	—	-19,7	-3,0
17	Cl	-12520,7	+ 18,2	—	-21,5	-2,6
18	Ar	-14354,6	+ 19,9	+44,1	-23,7	-2,3

*Примечание.* Энергии выражены в электронвольтах.  
При составлении таблицы принято 1 ат. ед. = 27,21 эВ.

чем энергии в приближении ХФ. Учет же явной зависимости поправки на остаточное самодействие от орбитального момента приводит к замечательно-му согласию с экспериментом для полных энергий рассмотренных атомов.

Отклонения расчетных значений потенциалов первой ионизации легких атомов от экспериментальных в зависимости от  $Z$  показаны на рис. 7.1 [37]. Данные, полученные в приближении ХФ, соединены линиями: штриховой — в случае, когда потенциалы ионизации оценивались по теореме Купманса как взятые с обратным знаком собственные значения, сплошной — при использовании разности полных энергий нейтрального атома и иона. Кружочки соответствуют погрешностям в потенциалах первой ионизации, полученных методом LSD с поправкой на остаточное самодействие. Приведенные результаты показывают, что метод LSD с поправкой на остаточное самодействие дает потенциалы первой ионизации, лучше согласующиеся с экспериментом. Данные, по которым построен рис. 7.1 приведены в табл. 7.2.

Таблица 7.3 содержит данные об энергии связи электрона в отрицательных ионах.

Таблица 7.2. Экспериментальные потенциалы ионизации легких атомов и результаты расчета их разными методами [37]

Z	Атом	Эксперимент	Метод ХФ		LSD-SIC
			$-\varepsilon_{\max}$	$E_{\text{ХФ}}^{(+)} - E_{\text{ХФ}}^{(0)}$	$-\varepsilon_{\max}$
2	He	24,587	24,98	23,45	25,8
3	Li	5,392	5,341	5,341	5,4
4	Be	9,322	8,416	8,043	—
5	B	8,298	8,432	7,932	—
6	C	11,260	11,79	10,79	—
7	N	14,543	15,44	13,96	14,9
8	O	13,618	17,19	11,89	—
9	F	14,422	19,86	15,72	—
10	Ne	21,564	23,14	19,84	22,9
11	Na	5,139	4,955	4,952	5,1
12	Mg	7,646	6,884	6,615	—
13	Al	5,986	5,714	5,507	—
14	Si	8,151	8,081	7,660	—
15	P	10,486	10,66	10,04	10,0
16	S	10,360	11,90	9,031	—
17	Cl	12,967	13,78	11,80	—
18	Ar	15,759	16,08	14,78	15,8
19	K	4,341	4,011	4,005	4,3 —
20	Ca	6,113	5,320	5,118	—
21	Sc	6,54	5,717	5,347	—
22	Ti	6,82	6,008	5,513	—
23	V	6,74	6,275	5,668	—
24	Cr	6,766	6,038	5,88	6,7
25	Mn	7,435	6,743	5,90	7,1
26	Fe	7,870	7,026	6,05	—
27	Co	7,86	7,279	7,78	—
28	Ni	7,635	7,515	7,62	—
29	Cu	7,726	6,476	6,40	—
30	Zn	9,394	7,959	7,65	—

*Примечание.* Потенциалы ионизации выражены в электронвольтах  $E_{\text{ХФ}}^0$ ,  $E_{\text{ХФ}}^+$  — энергии нейтрального атома и иона в приближении ХФ,  $\varepsilon_{\max}$  — максимальное собственное значение энергии заполненных электронных состояний.

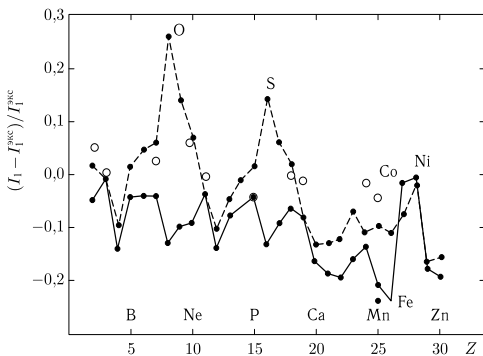


Рис. 7.1. Отклонение от эксперимента теоретических потенциалов первой ионизации легких атомов. Штриховая линия — приближение ХФ по теореме Купманса; сплошная линия — приближение ХФ с релаксацией; кружки — метод LSD

Таблица 7.3. Энергия связи электрона в отрицательных ионах [37]

Ион	ХФ	LSD-SIC	Эксперимент	Ион	ХФ	LSD-SIC	Эксперимент
H <sup>-</sup>	-0,33	0,7	0,75	Cl <sup>-</sup>	2,58	3,8	3,61
O <sup>-</sup>	-0,54	1,6	1,46	Br <sup>-</sup>	2,58		3,36
F <sup>-</sup>	1,36	3,6	3,45	I <sup>-</sup>	2,47		3,06

Квантовохимические методы расчета характеристик молекул, основанные на детерминантах Слэтера, приводят к резкому увеличению объема вычислений по мере роста числа атомов в молекуле и(или) заряда ядер составляющих ее атомов. Несмотря на большую сложность расчета, оперирующего детерминантами Слэтера, полученные в нем результаты хуже согласуются с экспериментом, чем результаты значительно менее трудоемкого расчета методом функционала локальной спиновой плотности.

Таблица 7.4 [37] содержит полученные в расчетах методом функционала локальной спиновой плотности энергии диссоциации, равновесные межатомные расстояния и частоты колебаний двухатомных молекул, состоящих из некоторых легких атомов. Там же приведены соответствующие экспериментальные данные.

Согласие с экспериментом равновесных расстояний и колебательных частот, полученных в рамках метода LSD, довольно хорошее: для молекул, включенных в табл. 7.4 [37], среднее отклонение от эксперимента составляет 0,05 ат.ед. для равновесных расстояний и 80 см<sup>-1</sup> для частот колебаний. Энергии диссоциации несколько завышены, среднее отклонение от эксперимента, по данным табл. 7.4, составляет 1,2 эВ. Как показывает расчет для молекулы азота N<sub>2</sub>, результаты которого приведены в скобках в соответ-

Таблица 7.4. Некоторые характеристики двухатомных молекул, полученные методом функционала локальной спиновой плотности, и сравнение их с экспериментом [37]

Молекула	$D$ , эВ		$R$ , ат. ед.		$\omega$ , см <sup>-1</sup>	
	Эксперимент	LSD	Эксперимент	LSD	Эксперимент	LSD
H <sub>1</sub>	4,8	4,9	1,40	1,45	4400	4190
Li <sub>2</sub>	1,1	1,0	5,05	5,12	350	330
B <sub>2</sub>	3,0	3,9	3,00	3,03	1050	1030
C <sub>2</sub>	6,3	7,3	2,35	2,35	1860	1880
N <sub>2</sub>	9,9	11,6(9,94)	2,07	2,07(2,07)	2360	2380
O <sub>2</sub>	5,2	7,6	2,28	2,27	1580	1620
F <sub>2</sub>	1,7	3,4	2,68	2,61	890	1060
Na <sub>2</sub>	0,8	0,9	5,82	5,67	160	160
Al <sub>2</sub>	1,8	2,0	4,66	4,64	350	350
Si <sub>2</sub>	3,1	4,0	4,24	4,29	510	490
P <sub>2</sub>	5,1	6,2	3,58	3,57	780	780
S <sub>2</sub>	4,4	5,9	3,57	3,57	730	720
Cl <sub>2</sub>	2,5	3,6	3,76	3,74	560	570

ствующей строке таблицы, учет поправки на остаточное самодействие к LSD должен существенно улучшить согласие расчетных энергий диссоциации с экспериментом.

### 7.3. Конденсированные среды

На рисунках 7.2, 7.3 [37] для ряда металлов показаны в зависимости от  $Z$  отклонения от эксперимента расчетных значений энергии связи атомов в кристалле и плотностей, соответствующих нулевым температуре и давлению.

Представленные результаты получены, как уже отмечалось [37], далеко не самым совершенным методом расчета зонной структуры и поэтому должны рассматриваться лишь как верхняя оценка точности, которая может быть достигнута в настоящее время при расчетах свойств кристаллов на основе метода функционала плотности.

Проведенные расчеты показали, что, за исключением лантанидов и легких актиноидов, теория в основном верно предсказывает устойчивую структуру. Лишь для натрия и золота ОЦК-структура оказывается выгоднее, чем наблюдаемые в экспериментах гексагональная с плотной упаковкой и гранецентрированная соответственно. Менее успешным оказалось предсказание устойчивых структур лантанидов и легких актиноидов, хотя и здесь число совпадений с экспериментом значительно. По-видимому, это связано с неадекватностью расчетного метода для металлов с незаполненной  $f$ -оболочкой.

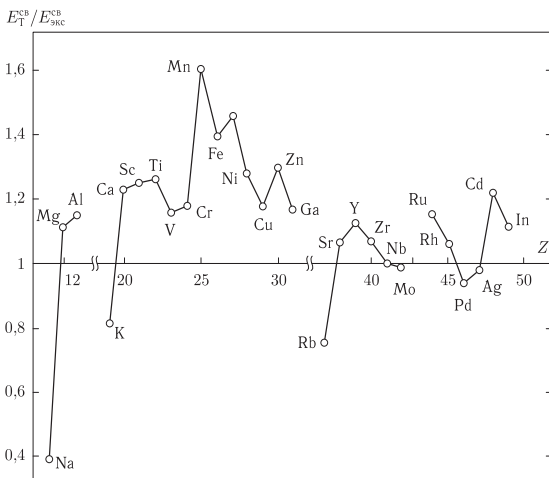


Рис. 7.2. Отклонения теоретических значений энергий связи атомов в некоторых металлах от экспериментальных [37]

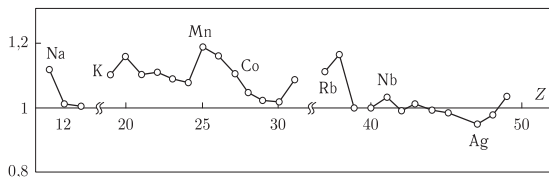


Рис. 7.3. Отклонения теоретических значений кристаллической плотности ряда металлов при нулевых давлении и температуре от экспериментальных [37]

Известной проблемой в расчетах зонной структуры является несоответствие экспериментальных значений ширины энергетической щели между заполненной и пустой зонами в изоляторах и результатов расчета в приближениях ХФ и функционала локальной спиновой плотности. Если в приближении ХФ завышение ширины щели происходит вследствие неучета корреляций, то причина занижения этой величины в приближении LSD может быть в том, что из-за различной степени локализации орбиталей в валентной и проводящей зонах остаточное самодействие различным образом влияет на величины соответствующих собственных значений. Например, в кристаллах благородных газов р-подобные валентные зоны узки и удалены от остальных зон,

Таблица 7.5. Энергетическая щель в кристаллах благородных металлов

Кристалл	$\Delta E_{\text{экс}}$	$\Delta E_{\text{ХФ}} - \Delta E_{\text{экс}}$		$\Delta E_{\text{LSD}} - \Delta E_{\text{экс}}$	$\Delta_{\text{SIC}}$
		без корреляции	с корреляцией		
Ne	21,4	+3,8	+0,9	-10,2	+9,9
Ar	14,2	+4,3	+1,0	-5,9(-0,7)	+5,8
Kr	11,6	+4,8	+1,8	-4,9	+4,9

подобно атомным  $p$ -состояниям. Поэтому можно ожидать, что при учете поправки на остаточное самодействие такое же смещение  $p$ -состояний, как наблюдается в атомных расчетах, будет иметь место и в кристаллах. В табл. 7.5 [37] приведены экспериментальные значения ширины щели ( $\Delta E_{\text{экс}}$ ) в кристаллах благородных газов и отклонения от них результатов расчетов в приближениях ХФ без учета и с приближенным учетом корреляций и функционала локальной спиновой плотности. Там же приведены разности ( $\Delta_{\text{SIC}} = E_{\text{пр}}^{\text{LSD}} - E_{\text{пр}}^{\text{LSD-SIC}}$ ) между энергиями внешних  $p$ -орбиталей, вычисленных без учета и с учетом поправки на остаточное самодействие. Все данные выражены в электронвольтах.

Представленные данные показывают, что смещение собственных значений внешних  $p$ -орбиталей в атомах благородных газов при учете поправки на остаточное самодействие практически совпадает с погрешностью теоретического определения щели в приближении LSD. Это позволяет предположить, что трудности приближения локальной плотности в данном случае связаны с остаточным самодействием. Результат, полученный при расчете для кристалла аргона с учетом поправки на остаточное самодействие и представленный в скобках в соответствующей строке таблицы, подтверждает такое предположение, свидетельствуя тем самым, что априори пренебрегать остаточным самодействием в кристаллах не следует.

Методы функционала плотности с успехом используются для расчета термодинамических свойств веществ. Наиболее часто метод функционала плотности применяется для расчета холодных кривых, изотерм  $T = 300$  К и ударных адиабат кристаллической фазы [38–42]. Так, в работе [38] приведены комнатные изотермы и ударные адиабаты Al, Cu, Ta, Mo и W, в работе [40] — холодная кривая Zn, в работе [40] — холодная кривая Al и комнатная изотерма Be, в работе [41] — изотерма  $T = 300$  К для Mg, в работе [42] — холодная кривая Al до сверхвысоких давлений около 100 Мбар. В качестве примера на рис. 7.4 показана холодная кривая алюминия [42] в сравнении с существующими уравнениями состояния, на рис. 7.5 приведена изотерма  $T = 300$  К для Mg [41] в сравнении с экспериментальными данными, а на рис. 7.6 ударная адиабата меди [38]. Метод Ферми–Зельдовича, описанный в главе 9, позволяет рассчитать изоэнтропы разгрузки алюминия в хорошем согласии с экспериментом (рис. 7.7).

Мы видим, что метод функционала плотности, будучи эквивалентен точному решению задачи многих тел, выгодно отличается от прямых квантово-механических методов значительно большей простотой и поэтому считается мощным средством описания широкого спектра физических свойств сложных

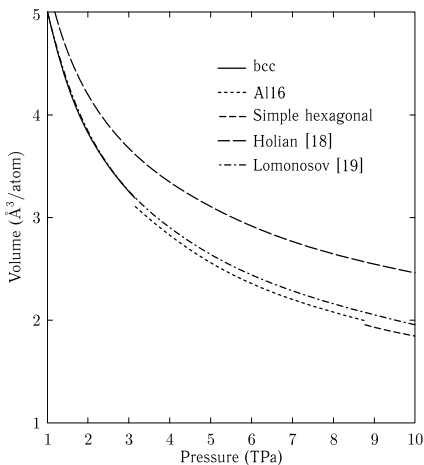


Рис. 7.4. Холодная кривая алюминия. Показаны расчеты по уравнениям состояния [17] и [18]

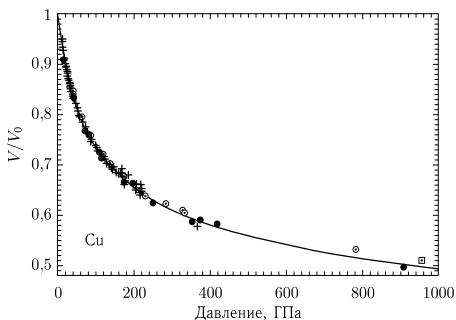


Рис. 7.5. Зависимость давления от степени сжатия для гексагональной плотноупакованной (сплошная линия) и объемно-центрированной (штриховая линия) решеток на изотерме  $T = 300$  К для Mg. Экспериментальные данные:  $\nabla$  — точка перехода из ГПУ в ОЦК решетку [19],  $\bullet$  — ГПУ [20],  $*$  — ОЦК [20],  $\square$  — [21],  $\circ$  — [22],  $\triangle$  — [23]

электронных систем. В физике конденсированного состояния его иногда называют «стандартной моделью», подчеркивая высокое качество даваемых им результатов.

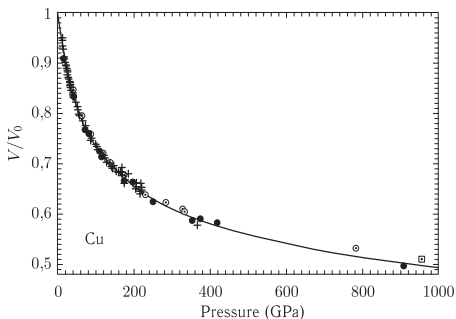


Рис. 7.6. Ударная адиабата меди. Сплошная линия — расчет методом функционала плотности. Эксперимент: + — [24], o — [25, 26], • — [27–29], □ — [30]

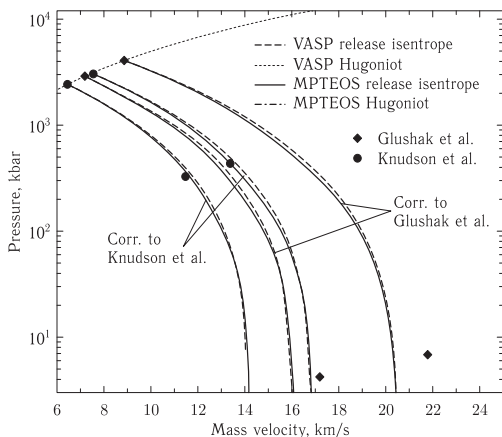


Рис. 7.7. Изоэнтропы разгрузки алюминия в координатах давление-массовая скорость. Линии — расчет по полуэмпирическому уравнению состояния [43] и методом функционала плотности, значки — экспериментальные данные [44, 45]

Этот метод не заменяет, а дополняет существовавшие ранее подходы, открывая еще один путь построения приближенных решений проблемы многих тел. Если ранее приближенные решения находились, как правило, путем обрезания или частичного суммирования рядов, то метод функционала плотности позволяет строить приближения, исходя из аналогий с другими, более

простыми системами, решение для которых найдено независимыми методами. Этот в высокой степени физический подход еще далеко не исчерпал своих возможностей и обещает в будущем много интересных результатов.

### Список литературы

1. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В. Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, №9. — С. 3.
2. March N., Murray A. // Proc. Roy. Soc. — 1961. — V. A261. — P. 119.
3. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. — 1964. — V. 136, No. 3B. — P. B864.
4. Levy M. Electron densities in search of Hamiltonians // Phys. Rev. A. — 1982. — V. 26, No. 3. — P. 1200.
5. Lieb E. Density functionals for Coulomb systems // Int. J. Quant. Chem. — 1983. — V. 24, No. 243.
6. Mermin N. D. Thermal Properties of the Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. — 1965. — V. 137, No. 5A. — P. A1441.
7. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. — 1965. — V. 140, No. 4A. — P. A1133.
8. Perdew J. P., Burke K. Comparison shopping for a gradient-corrected density functional // Int. J. Quant. Chem. — 1996. — V. 57. — P. 309.
9. Perdew J. P., Kurth S. Density Functionals: Theory and Applications / Ed. by Joubert. — Springer, 1998. — P. 8.
10. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals // Rev. Mod. Phys. — 1999. — V. 71, No. 5. — P. 1253.
11. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 41, No. 11. — P. 7892.
12. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. — 1999. — V. 59, No. 3. — P. 1758.
13. Car R., Parrinello M. Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // Phys. Rev. Lett. — 1985. — V. 55, No. 22. — P. 2471.
14. Slater J. C., Koster G. F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem // Phys. Rev. — 1954. — V. 94, No. 6. — P. 1498.
15. Andersen O. K. Linear methods in band theory // Phys. Rev. B. — 1975. — V. 12, No. 8. — P. 3060.
16. Slater J. C. Wave Functions in a Periodic Potential // Phys. Rev. — 1937. — V. 51, No. 10. — P. 846.
17. Lomonosov I. V. Multi-phase equation of state of aluminum // Laser and Part. Beams. — 2007. — V. 25. — P. 567.
18. Holian K. S. A new equation of state fo aluminum // J. Appl. Phys. — 1986. — V. 59. — P. 149.
19. Olijnyk H., Holzapfel W. B. High-pressure structural phase transition in Mg // Phys. Rev. B. — 1985. — V. 31, No. 7. — P. 4682.
20. Olijnik H. // J. Phys.: Condens. Matter. — 2004. — V. 16. — P. 8791.
21. Clendenen G. L., Drickamer H. G. Effect of Pressure on the Volume and Lattice Parameters of Magnesium // Phys. Rev. — 1964. — V. 135, No. 6A. — P. A1643.
22. Effect of Very High Pressure on the Structure of Some hcp Metals and Alloys / Perez-Albuerne E. A., Clendenen R. L., Lynch R. W., Drickamer H. G. // Phys. Rev. — 1966. — V. 142, No. 2. — P. 392.

23. *Errandonea D., Meng Y., Hausserman D., Uchida T.* // J. Phys.: Condens. Matter. — 2003. — V. 15. — P. 1277.
24. Los Alamos Shock Hugoniot Data / Ed. by S. P. March. — Berkeley: University of California Press, 1979.
25. *Mitchell A. C., Nellis W. J.* // J. Appl. Phys. — 1981. — V. 52. — P. 3363.
26. *Mitchell A. C. et al.* // J. Appl. Phys. — 1991. — V. 69. — P. 2891.
27. *Альтшулер Л. В., Крупников К. К., Бражник М. И.* // ЖЭТФ. — 1958. — Т. 34. — С. 886.
28. *Альтшулер Л. В., Кормер С. Б., Баканова А. А., Трунин Р. Ф.* // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 790.
29. *Альтшулер Л. В., Баканова А. А., Трунин Р. Ф.* // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42. — С. 91.
30. *Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н.* // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42. — С. 686.
31. *Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробега и уравнений состояния. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000.
32. *Parr R. G., Yang W.* Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. — N.Y.: Oxford Univ. Press, 1989.
33. *Dreizler R. M., Gross E. K. U.* Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-body Problem. — Berlin: Springer-Verlag, 1990.
34. *Martin R.* Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. — Cambridge: University Press, 2004.
35. *Perdew J. P., Kurth S.* Density Functionals: Theory and Applications // Lecture Notes in Physics / Ed. by D. Joubert. — Berlin: Springer, 1998. — P. 8.
36. *Кон В.* Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // УФН. — 2002. — Т. 172, № 3. — С. 336.
37. *Синько Г.* Описание систем многих частиц методом функционала плотности // Математическое моделирование / Под ред. Н. Калиткина. — М.: Наука, 1989. — С. 197.
38. *Wang Y., Chen D., Zhang X.* Calculated Equation of State of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa // Phys. Rev. Lett. — 2000. — V. 84, No. 15. — P. 3220.
39. *Sin'ko G. V., Smirnov N. A.* Effect of electronic topological transitions on the calculations of some Zn and Fe properites // J. Phys.: Condens. Matter. — 2005. — V. 17. — P. 559.
40. *Sin'ko G. V., Smirnov N. A.* Relative stability and elastic properties of hcp, bcc, and fcc beryllium under pressure // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 71, No. 21. — P. 214108.
41. *Sin'ko G. V., Smirnov N. A.* Ab initio calculations for the elastic properties of magnesium under pressure // Phys. Rev. B. — 2009. — V. 80, No. 10. — P. 104113.
42. *Pickard C. J., Needs R. J.* Aluminium at terapascal pressures // Nature Mat. — 2010. — V. 9. — P. 624.
43. *Хищенко К. В., Фортон В. Е.* К вопросу об уравнении состояния алюминия в области отрицательных давлений // Физика экстремальных состояний вещества — 2002 / Под ред. В. Е. Фортова и др. — Черноголовка: ИПХФ РАН, 2002. — С. 68.
44. *Glushak B. L., Zharkov A. P., Zhernokletov M. V. et al.* // Sov. Phys.-JETP. — 1989. — V. 69. — P. 739.
45. *Knudson M. D., Assay J. R., Deeney C.* // J. Appl. Phys. — 2005. — V. 97. — P. 073514.

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ**

Из рассмотрения различных моделей термодинамического описания физических свойств среды ясно, что обычная классификация состояний в области высоких давлений и температур зачастую теряет свою определенность и является условной, а границы между фазами либо исчезают вовсе, либо становятся нечеткими и соответствуют, по существу, непрерывной взаимной трансформации близких состояний. В данной главе рассмотрены соотношения между различными фазами вещества, что позволит более определенно представить общий вид фазовой диаграммы с учетом реальных и гипотетических фазовых переходов.

**8.1. Плавление**

Плавление является одним из наиболее универсальных и хорошо изученных фазовых превращений и, будучи переходом от упорядоченной к неупорядоченной структуре, связано с исчезновением дальнего порядка в системе. При этом важным является вопрос о существовании на кривой плавления критической точки II типа, в которой фазовый переход первого рода сменяется переходом второго рода, так как в соответствии с результатами Ландау [1] кривая плавления оканчиваться критической точкой не может. Необходимым условием этого является одновременное обращение в нуль при плавлении скачков объема  $\Delta V_m$  и энтропии  $\Delta S_m$ , и потому экспериментальная проверка предсказаний теории сводится к измерению этих величин при высоких давлениях [2–6].

Имеющиеся к настоящему времени эксперименты по температурным изменениям при высоких давлениях 0,5–3 Мбар [4] и объемные измерения в статических условиях [5, 6] свидетельствуют в пользу гипотезы об отсутствии критических точек II типа, так как скачки объема и энтропии при плавлении не исчезают с ростом давления. Интересно отметить, что предельные измеренные значения  $\Delta S_m$  оказываются больше  $R \ln 2$ , т. е. минимального значения, связанного с исчезновением дальнего порядка при переходе от упорядоченной к неупорядоченной структуре [2, 3].

Детальное сопоставление имеющихся экспериментальных данных с теоретическими результатами, полученными для некоторых простых систем (благородные газы, однокомпонентная плазма, заряженные сферы, щелочные металлы), указывает на ведущую роль структурной зависимости потенциальной энергии в явлении плавления [2, 3], которая, в свою очередь, слабо зависит от конкретной природы межмолекулярных сил и для модельных систем мо-

жет быть реализована с использованием предельно упрощенных потенциалов твердых и мягких сфер. Важно, что данные этих моделей также свидетельствуют об отсутствии критических точек, что находится в соответствии с общим выводом [1].

Для количественного описания кривой плавления в настоящее время широко применяется критерий Линдемманна, согласно которому твердое тело плавится, когда амплитуда тепловых колебаний атомов решетки  $q$  составляет определенную часть  $A$  межатомного расстояния в кристалле  $R$ :

$$A^2 = \frac{q^2}{R^2} = \frac{\langle E\omega^{-2} \rangle}{MR^2}, \quad (8.1)$$

где усреднение производится по всем модам тепловых колебаний  $\omega_i$ , а энергия  $i$ -й моды в квазигармоническом приближении

$$E_i = \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/kT} - 1}. \quad (8.2)$$

Реальный спектр тепловых колебаний и зависимость его от объема в большинстве случаев чрезвычайно сложны, что заставляет использовать модельные представления. Для высокотемпературного плавления  $E_i = kT$  и в дебаевском приближении из (8.1) следует традиционная форма условия Линдемманна:

$$\frac{T_m}{\omega_D^2 V_m^{2/3}} = \text{const},$$

где  $\omega_D$  — дебаевская частота. В общем случае произвольного спектра [7]

$$\frac{d \ln T_m}{d \ln V_m} = 2 \left( \frac{\langle \gamma \omega^{-2} \rangle}{\langle \omega^{-2} \rangle} - \frac{1}{3} \right), \quad \gamma_i = - \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln V}. \quad (8.3)$$

Обычными, упрощающими (8.3) предположениями является условие

$$\langle \gamma \omega^{-2} \rangle = \langle \gamma \rangle \langle \omega^{-2} \rangle \quad (8.4)$$

и замена среднего значения  $\langle \gamma \rangle$  на термодинамическую величину — коэффициент Грюнайзена,  $\gamma = V(\partial p / \partial E)_V$ , что справедливо при высоких ( $T > 0,1\hbar\omega_D/k$ ) температурах. Из (8.3) следует монотонное возрастание температуры плавления при сжатии, поскольку экспериментальные значения  $\gamma$  превосходят  $1/3$ .

Несмотря на чисто эмпирическое происхождение, соотношение Линдемманна широко используется в геофизических и астрофизических приложениях, при исследовании вигнеровской кристаллизации электронов, «холодного» плавления сильно сжатого вещества и т. д. Естественно, что возникает вопрос о теоретическом обосновании правила Линдемманна и границах его применимости.

Можно показать, что соотношение Линдемманна является строгим следствием автомодельности неидеальной части статистической суммы системы частиц, взаимодействующих по закону  $U(r) \sim 1/r^n$ .

Подчеркнем в этой связи, что кривые плавления типа  $c \frac{dT}{dp} < 0$  и  $c \frac{dT}{dp} = 0$  невозможно получить в классе систем с взаимодействием вида  $U(r) \sim 1/r^n$ . Действительно, как нетрудно показать [2, 3], для плавления систем со степенным взаимодействием имеют место следующие соотношения

$$p \sim T^{1+3/n}, \quad \frac{\Delta V}{V_S} = \text{const}, \quad \Delta S = \text{const},$$

где  $p$  и  $T$  — координаты кривой плавления,  $\Delta V/V_S$  — относительный скачок объема при плавлении,  $\Delta S$  — скачок энтропии при плавлении.

При включении притягивающего взаимодействия это соотношения получают смысл высокотемпературных асимптотических соотношений, что естественно, исключает равенства  $dT/dp = 0$  и  $\Delta V = 0$  при любых конечных температурах и давлениях.

Конкретные характеристики плавления можно рассчитать с учетом условий (8.3), (8.4), если известен закон изменения коэффициента Грюнайзена от объема, который в обобщенной форме [8] имеет вид

$$\gamma(V) = \frac{t-2}{3} - \frac{V (p_x V^{2t/3})''}{2 (p_x V^{2t/3})'_V}, \quad (8.5)$$

где  $t = 0$  соответствует приближению Слэтера–Ландау,  $t = 1$  — модели Дугдейла–Макдональда, а  $t = 2$  — теории свободного объема Ващенко–Зубарева [9], причем  $p_x = p(V, T = 0 \text{ К})$  — давление на нулевой изотерме. Методы определения параметра  $t$  в (8.5) и способы нахождения зависимости  $\gamma(V)$  по данным статических и динамических экспериментов рассмотрены в гл. 9. Здесь мы только укажем, что в общем случае оптимальное значение  $t$  может иметь и не целочисленное значение; так, экспериментально зафиксированную при высоких давлениях кривую плавления магния [10] удалось описать при  $t = 0,55$  (рис. 8.1).

Отметим, что применяемые на практике законы плавления [2, 3] Симона и Крота–Кеннеди следуют при известных допущениях из закона Линдемманна. Обобщение и переформулировка критерия (8.1) для произвольного потенциала межчастичного взаимодействия методами статистической механики [11] являются дополнительным его подтверждением.

Машинные расчеты методом Монте–Карло системы твердых сфер [12] также показали применимость критерия Линдемманна вплоть до стократного увеличения температуры и четырехкратного — плотности, причем плавление наступает при 10%-ном линейном отклонении от плотной упаковки сфер. Будучи основан на простых физических соображениях, этот критерий приобрел большую популярность в задачах теплового и холодного плавления, при исследовании плазменной кристаллизации.

В последнем случае прямое наблюдение колебания частиц в кристаллической фазе (гл. 2) позволяет найти среднеквадратное отклонение частиц кристалла от положения  $(q\sqrt{\langle r \rangle^2})$  равновесия и показать, что при плавлении оно близко к  $(0,15 \div 0,25)$  межчастичного расстояния  $A$  в соответствии с критерием (8.1).

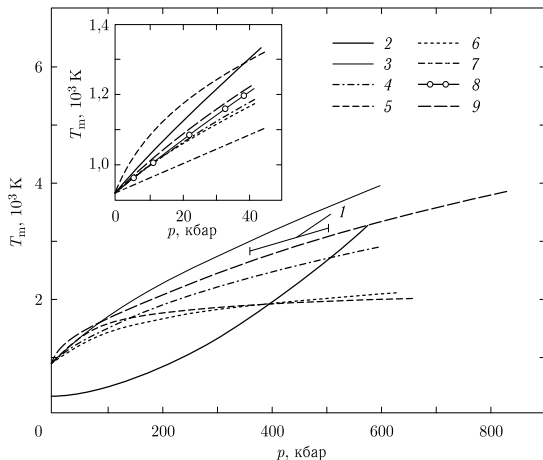


Рис. 8.1. Плавление магния при ударном нагружении [11]. 1 — эксперимент; 2 — ударная адиабата; 3, 4, 7, 9 — расчет по (8.5) при  $t = 0$ ; 1; 2; 0,55; 5 — закон Симона; 6 — Крота-Кеннеди; 8 — статические данные

Интересно, что изучение плавления на кинетическом уровне (прямым наблюдением) показывает (рис. 2.7), что плавление кристалла происходит не однородно по всему объему, а по гетерогенному механизму. Однородный кристалл разбивается на движущиеся кластеры с внутренней кристаллической структурой, которые по мере роста температуры измельчаются, осуществляя переход к однородной жидкости. Эти выводы находятся в соответствии с моделью гетерогенного плавления, полученного методами молекулярной динамики, — нагрев кристаллической решетки приводит к росту дислокаций, число которых увеличивается с ростом температуры и разрушает кристаллическое состояние в точке плавления в соответствии с дислокационной моделью Крафт-Махера.

При учете реального спектра колебаний в кристалле из (8.3) можно получить и отрицательный наклон кривой плавления [13, 14], являющийся следствием аномальной объемной зависимости одной из длинноволновых мод колебаний, что позволяет описать немонотонный ход кривых плавления. Например, обнаруженное экспериментально смягчение поперечных акустических мод в фоновом спектре объемноцентрированной решетки бария под давлением позволило объяснить наличие максимума на кривой плавления уменьшением стабильности этой решетки [15]. Изменение характера межчастичного взаимодействия в результате электронной перестройки может также явиться одной из возможных причин немонотонного изменения температуры на кривой плавления, как это наблюдается у цезия и церия.

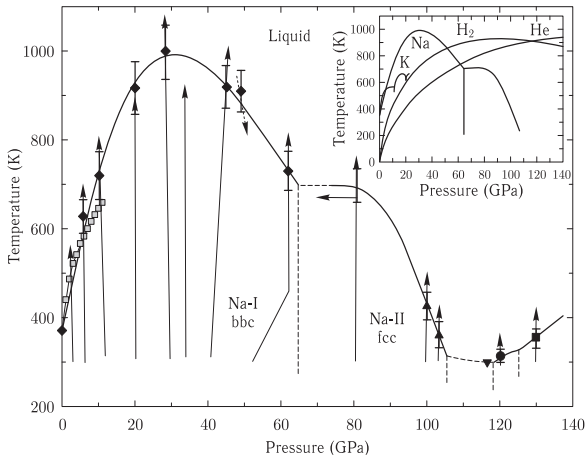


Рис. 8.2. Кривая плавления Na до 130 ГПа. Закрашенные символы — данные работы [17], незакрашенные квадраты [16]. Сплошная линия — кривая плавления (см. подробнее [17]). Штриховые линии показывают предположительные границы фаз. Стрелками показан изменение  $p$ - $T$  в экспериментах [17] (маленький сдвиг в давлении из-за разогрева не отображается). На вставке кривая плавления Na [17] в сравнении с кривой плавления  $H_2$  [18], He [19] и K [16]

На рис. 8.2 [17] приведена кривая плавления Na с указанием bcc и fcc фаз твердого состояния. Видно, что особенности кривой плавления коррелирует со структурой кристалла в состоянии предплавления и, по-видимому, в жидкой фазе в какой-то мере сохраняет черты соответствующей структуры. Подобные корреляции прослеживаются и в случае (рис. 8.3) [20] диоксида урана и кальция (рис. 8.4) [21].

В связи с планетарными приложениями в последнее время были проведены изучения кривой плавления с использованием мощных лазерных ударных волн [30], что показало отрицательный наклон этой кривой в области высоких давлений (рис. 8.5, 8.6, 8.7).

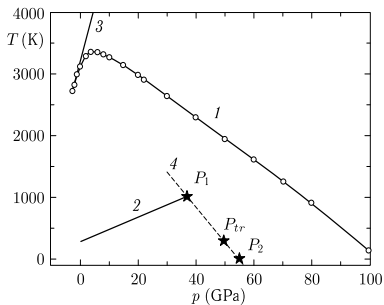


Рис. 8.3. Фазовая диаграмма полиморфных модификаций  $UO_2$  и их расплавов [20]

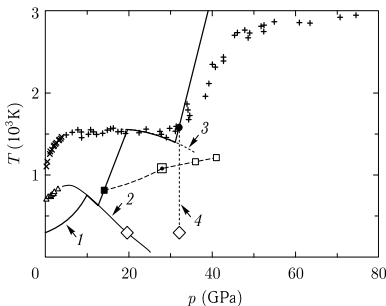


Рис. 8.4. Фазовая диаграмма и термодинамические состояния кальция при многократном ударном сжатии:  $\Delta$  — экспериментальные данные [22] для линии равновесия ГЦК-ОЦК;  $x$  — экспериментальные данные [22] для кривой плавления ОЦК фазы;  $+$  — экспериментальные данные [23] для кривой плавления Са;  $\diamond$  — давления фазовых переходов кальция при комнатной температуре [24, 25]. Кривая 1 — рассчитанные нами ударные адиабаты однократного сжатия монокристаллического Са; 2 — расчет участка линии равновесия ГЦК-ОЦК; 3 — расчет участка линии равновесия ОЦК-расплав; штриховые линии — расчетные адиабаты ступенчатого ударного нагружения; пунктир 4 — линия равновесия ОЦК-ПК [23];  $\blacksquare$  — ТД состояние ОЦК Са в первой ударной волне;  $\square$  — ТД состояние вблизи линии равновесия ОЦК-ПК, для которого кристаллическая фаза однозначно не определена (см. [21]);  $\square$  — оценка ТД состояний в ПК фазе;  $\bullet$  — ТД состояние расплава Са в первой ударной волне [21]

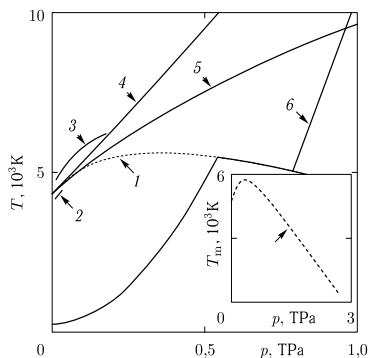


Рис. 8.5. Кривая плавления и температура вдоль ударной адиабаты алмаза. 1 — кривая плавления [26]; 2 — [27]; 3 — [28]; 4 — касательная к кривой плавления 10,2 К/ГПа в тройной точке ( $\bullet$ ) [29]; 5 — кривая плавления [26]; 6 — температура на ударной адиабате для монокристаллического алмаза [26]

Непростое поведение высокотемпературной кривой плавления азота [42] связывается (рис. 8.8) с образованием полимерной фазы азота и его аморфизацией, а найденный в работе [43] максимум на кривой плавления водорода

Рис. 8.6. Фазовая диаграмма углерода при высоких плотностях энергии. Сплошная серая линия — фазовые границы из [31]; штрих-пунктирная серая линия — кривая плавления алмаза [32]; штриховая серая линия — кривая плавления алмаза [33]; сплошная серая линия — предсказание адиабаты для Нептуна [34]; сплошная черная линия, ударная адиабата [30]

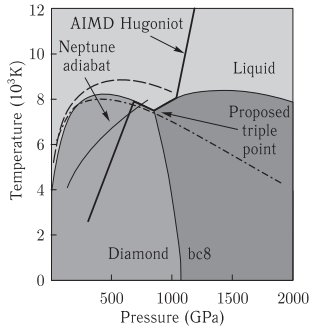
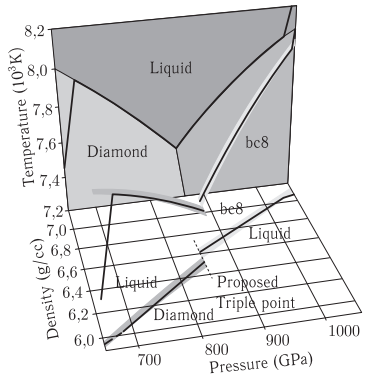


Рис. 8.7. Фазовая диаграмма углерода (с ударной адиабатой) в пространстве  $p$ - $\rho$ - $T$ . Ударная адиабата стартует с давления  $p \approx 680$  ГПа ( $6,02$  г/см<sup>3</sup>), достигает тройной точки при  $p \approx 850$  ГПа и покидает диаграмму при  $p \approx 1040$  ГПа ( $7,04$  г/см<sup>3</sup>). Ударная адиабата имеет два решения на предложенной тройной точке: 1) смесь алмаза и жидкости ( $6,52$  г/см<sup>3</sup>) и 2) смесь bc8-фазы и жидкости ( $6,62$  г/см<sup>3</sup>) [30]



(рис. 8.9) объясняется дефектами диссоциации и ионизации при высоких давлениях [44].

Отрицательное значение  $dT_m/dp_m$  можно объяснить ряде случаев и в рамках модели двухкомпонентной жидкости [45, 46], согласно которой жидкость представляет смесь частиц двух сортов, являющихся либо образованиями с разными координационными числами, либо атомами с происшедшим или нет электронным переходом. Первый случай осуществляется для веществ, имеющих малоплотные фазы низкого давления, причем отрицательный наклон кривой плавления возникает из-за наличия вблизи фазовой границы образований с координационными числами фазы высокого давления. Подтверждением этого является анализ структурных данных, который указывает на существование (Hg, Sn) или даже доминирующую роль (Bi, Sb, Ga) образований фазы высокого давления в жидкости вблизи кривой плавления [45, 46].

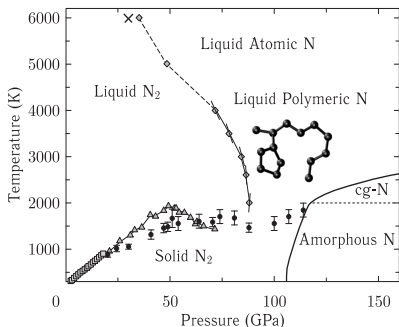


Рис. 8.8. Фазовая диаграмма N (с областью метастабильного аморфного N). Экспериментальные данные: квадраты [35], треугольники [36], и кружочки [37]. Известная сильносжатая твердая полимерная фаза отделена сплошной линией (пунктиром — нет точных данных) [38–41]. Структурная формула, соответствующая полимерной жидкости, отображена в соответствующей области. Рис. из [42]

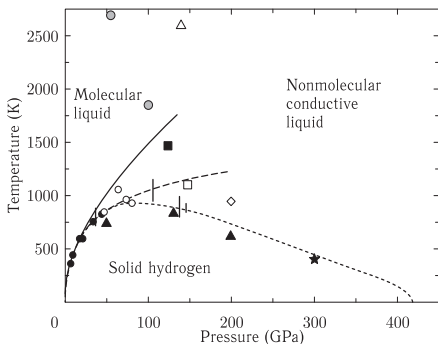


Рис. 8.9. Фазовая диаграмма водорода. Низкотемпературная межфазная граница рассчитана по модели [43]

Иная ситуация осуществляется в случае плавления металлов, допускающих, как, например, лантаниды, возможность перестройки электронной структуры. Экспериментально обнаруженные изломы и сильное уменьшение сжимаемости на ударных адиабатах редкоземельных элементов [47–49] объяснялись завершением электронных переходов [48, 50] или большой жесткостью внутренней заполненной  $5p^6$  оболочки ксенона [49]. В работе [51] впервые было отмечено, что экспериментальные изломы ударных адиабат лан-

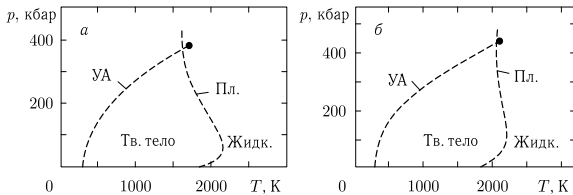


Рис. 8.10. Фазовые диаграммы тулия (а) и эрбия (б) [47]. Штриховые линии — расчет температуры на ударной адиабате (УА) и кривой плавления (Пл.), значки — плавление на ударной адиабате по данным экспериментов

танидов лежат в большинстве случаев в районе проэкстраполированных из области низких давлений кривых плавления, причем существенная величина изломов свидетельствует в пользу больших отрицательных значений  $dT_m/dp_m$  при пересечении двухфазной области.

Тщательные измерения ударных адиабат лантанидов [47] позволили на основе ударноволновых и статических данных получить кривые плавления вплоть до высоких ( $p \lesssim 1$  Мбар) давлений и определить положение места их пересечения с адиабатами, которое для всех металлов достаточно четко совпало с экспериментальным изломом (рис. 8.10). Поскольку фазы высокого давления редкоземельных элементов имеют плотнейшие упаковки, то обнаруженный аномальный ход кривых плавления и, вследствие этого, большую плотность жидкости нельзя объяснить наличием в ней более высоких координационных чисел. Основываясь на модели двухкомпонентной жидкости, из этого можно сделать вывод, что в атомах жидкости с ростом давления непрерывно происходит электронная перестройка, повышающая ее плотность. В твердой фазе перестройка электронной структуры осуществляется при этом либо также непрерывно (типа церия), но с иной скоростью, либо начиная с тройной точки (как у цезия), что и приводит к аномалиям в кривых плавления лантанидов.

Конкретный механизм перестройки, приводящий к повышению плотности и уменьшению сжимаемости, может быть различным и объясняется либо завершением s-d-электронных переходов и образованием мало-сжимаемых оболочек (лантан [52]), либо резким уменьшением металлического радиуса иона при делокализации f-электронов (церий [53], празеодим [54]). Подчеркнем, что соответствие места изломов ударных адиабат лантанидов их пересечению с кривыми плавления не является обязательным и излом (или резкий изгиб [52] — см. рис. 3.6), вследствие перераспределения электронов, может происходить также в твердой фазе. Однако в лантанидах это соответствие является достаточно убедительным из-за аномального хода кривых плавления и невысоких температурах на них, а также значительных давлений, соответствующих электронной перестройке. Ситуация иного рода наблюдается, по всей видимости, у тугоплавких металлов (Ti, Zr, Hf), где завершение s-d переходов на ударной адиабате происходит в твердой фазе и сопровождается структурным фазовым переходом.

Максимум на кривой плавления появляется также при экстремально высоких давлениях вещества ввиду действия квантовых эффектов [55]. По мере сжатия кристалла пространственная локализация ядер приводит к росту неопределенности импульса и, следовательно, увеличению амплитуды нулевых колебаний, энергия которых  $\hbar\omega_D \sim \hbar\omega_0 \sim n^{1/2}$  ( $\omega_D$  и  $\omega_0$  — дебаевская и плазменная частоты ионов) с ростом плотности увеличивается быстрее, чем стабилизирующая решетку кулоновская энергия  $\sim n^{1/3}$ . Это в конечном счете приводит к плавлению кристалла при  $T = 0$  К, т. е. область существования кристаллического состояния оказывается ограниченной. Оценки предельных плотностей кристаллов обладают весьма большой неопределенностью, но во всяком случае соответствуют экстремальным значениям  $\rho$ , порядка  $10^3$ – $10^8$  г/см<sup>3</sup> [56, 57].

## 8.2. Полиморфные и электронные превращения

При давлениях в сотни килобар в зависимости от термодинамических условий твердые тела могут обладать различными кристаллическими структурами, переход между которыми приводит к появлению дополнительных фазовых границ. Классификация и описание полиморфных фазовых переходов является громоздким и сложным делом, требующим точных вычислений энергии и фононных спектров конкурирующих модификаций, и поэтому основным источником информации о полиморфных переходах являются прямые статические и динамические эксперименты [58]. Общей тенденцией фазовых превращений является переход под действием давления кристаллического вещества в более плотноупакованные структуры, обладающие максимальными координационными числами. По данным динамических измерений [59, 60] полиморфные фазовые переходы заканчиваются при давлениях 0,5–1 Мбар.

Поведение «простых» металлов оказалось значительно богаче и интересней, чем это следовало из упрощенных моделей [61].

Ударно-волновое сжатие [62] «простых» металлов демонстрирует удивительное и весьма нетривиальное поведение вырожденной сильнонеидеальной плазмы в мегабарном диапазоне давлений [61–63]. Согласно существовавшим до сих пор представлениям [64], электронные свойства щелочных металлов описываются простейшей моделью однородного электронного Ферми-газа с расположенными в нем точечными ионами. Однако, более современные и изощренные квантовомеханические модели [61, 63] предсказывают формирование при повышенных давлениях сложных кристаллических структур с высокими координационными числами, в которых происходит «спаривание» электронов проводимости и, как следствие, уменьшение электропроводности в диапазоне давлений 0,3–1,0 Мбар.

Выполненные эксперименты по квазиadiaбатическому сжатию Li, Na, и Ca в этом диапазоне динамических давлений [61, 62, 65] уверенно продемонстрировали этот необычный эффект — вызванную давлением «диэлектризацию» простых металлов [61, 62, 65] (рис. 8.11). Видно, что сжатие этих металлов сначала понижает их электропроводность («диэлектризация»), а начиная с 1,2–2 Мбар они опять переходят в «металлическое» состояние,

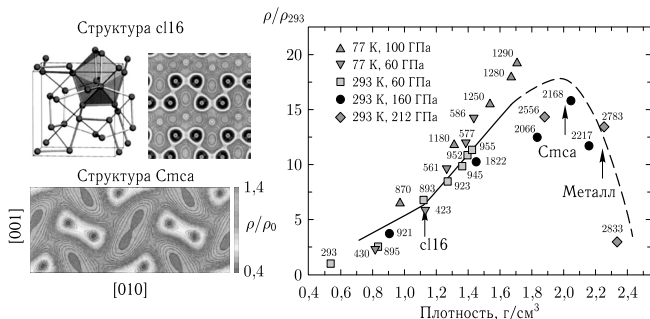


Рис. 8.11. Вызванная давлением «диэлектризация» вырожденной плазмы [65]. Слева показана структура и распределение электронной плотности фазы высокого давления

которое, по-видимому, будет полностью сохраняться при дальнейшем сжатии (рис. 8.11).

Качественные особенности фазовой диаграммы веществ с учетом полиморфных переходов между различными вариантами плотных упаковок удалось воспроизвести расчетными методами молекулярной динамики с использованием потенциала взаимодействия с прямоугольной ямой [66, 67], соответствующей эффективному притяжению между атомами в кристаллической решетке (рис. 8.12). Расчеты со ступенчатым потенциалом [66, 67], имитирующим изменение ионного радиуса, позволили объяснить детали изоструктурных превращений в металлах и получить характерные для цезия и церия аномальные типы фазовых диаграмм.

В сжатом веществе происходит также предсказанные еще Ферми электронные фазовые переходы, непосредственно не связанные с изменением симметрии кристаллической решетки и вызванные перестройкой электронной структуры элементов. Наиболее показательными в этом отношении являются превращения, наблюдаемые у металлов длинных периодов, имеющих инверсию в заполнении энергетических уровней. При повышении давления происходит перераспределение электронов по оболочкам и постепенное снятие инверсности, что вызывает изменение энергии связи кристалла и приводит к структурным фазовым переходам.

Основным фактором, определяющим тип кристаллической решетки металлов, является число связывающих d-электронов. s-d-переход и увеличение заселенности d-полосы при сжатии переходных и даже простых металлов служит, как видно из расчетов [68, 69], главной причиной наблюдаемой последовательности фаз в этих элементах. Аналогичные вычисления энергии связи различных структур трехвалентных лантанидов [70] показали соответствие полученного расчетно оптимального типа решетки экспериментально наблюдаемому, с увеличением при сжатии числа d-электронов от 1,5 до 2,7 и полным неучастием в процессе перераспределения f-электронов.

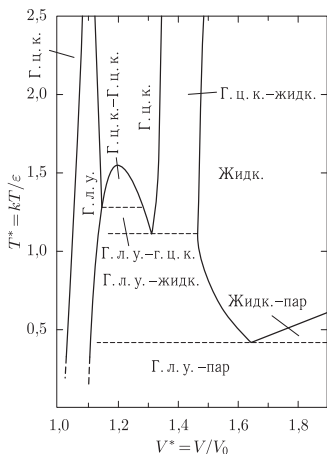


Рис. 8.12. Фазовая  $p$ - $V$ -плоскость системы частиц с потенциалом взаимодействия с прямоугольной ямой [66, 67]. Полиморфные модификации твердой фазы имеют гранецентрированную кубическую (г.ц.к.) и гексагональную плотно-упакованную (г.п.у.) решетки. Интересен изоструктурный г.ц.к.-г.ц.к.-переход с критической точкой, наблюдаемой у церия

следовательность структурных фазовых переходов I рода, приводящая к наиболее плотной гранецентрированной кубической решетке, дополняется при дальнейшем повышении давления фазовым переходом II рода, который заключается в нарастающем искажении гранецентрированной структуры и возникает за счет сложной гибридизации полос при высоких степенях сжатия. Этот переход также свидетельствует об ограниченности одночастичных расчетов [68–70] в таких условиях.

Своеобразные особенности свойственны электронным переходам в лантанидах, связанным с выдавливанием в полосу проводимости узких, по существу имеющих локализованный характер,  $f$ -зон. Такой электронный переход с локализованного уровня в коллективизированное состояние сопровождается явлением промежуточной валентности [74], которое заключается в наличии у каждого атома нецелого числа электронов проводимости. Элементом, показывающим такого рода переход, является иттербий, у которого при сжатии от 40 до 300 кбар наблюдается [75], без изменения кристаллической структуры, плавное увеличение числа валентных электронов от 2 до 3, с соответ-

Дополнительным подтверждением того, что трехвалентные лантаниды ведут себя при умеренном изменении объема подобно переходным металлам, является экспериментальное обнаружение свойственной членам ряда последовательности фаз у иттрия [71], относящегося к тому же III периоду, но не содержащего  $f$ -электроны.

Неожиданным фактом, нарушающим сложившуюся картину, оказалось появление при высоких давлениях у скандия, первого переходного металла III периода, редкой кристаллической решетки  $\beta$ -фазы нептуния [72]. Это в первую очередь указывает на недостаточность в данном случае приближенных зонных расчетов [68–70], не учитывающих гибридизацию  $s$ - $d$ -полос, которая приводит к такой решетке, а также на малый вклад  $5f$ -электронов в энергию связи актинидов, поскольку для них структуры типа  $\beta$ -фазы нептуния являются обычными. Заметный интерес представляет экспериментальная работа [73], в которой исследуется структура лантанидов при высоких ( $p \lesssim 500$  Кбар) статических давлениях. Было обнаружено, что по-

ствующей перестройкой электронной структуры от состояния  $4f^{14}(5d6s)^2$  до  $4f^{13}(5d6s)^3$ . Не исключено, впрочем, что этот переход связан с рассматриваемым ниже процессом делокализации.

Электронные фазовые переходы не обязательно должны быть связаны с изменением симметрии кристаллической решетки и, более того, реализуются как в твердой, так и в жидкой фазах. Наиболее характерным примером является моттовский переход, соответствующий делокализации электронных оболочек при сжатии. Заселенность уровней в этом случае меняется слабо, однако при критическом значении сжатия происходит изменение характера электронных состояний и электронная оболочка становится полосой проводимости. Моттовский переход может происходить без структурной перестройки и заканчиваться критической точкой, что дает основание рассматривать его как фазовый переход «газ-электронная жидкость» [76].

Наиболее изученным экспериментально металлом с таким переходом является церий [58], у которого при невысоких температурах делокализация  $4f$ -электрона приводит при сжатии к заметному (15%) уменьшению размера иона, вызывающему изоструктурный фазовый переход с критической точкой. Следующий за церием в ряду лантанидов празеодим обнаруживает при давлении  $p \approx 200$  кбар связанный с делокализацией  $4f$ -электронов структурный фазовый переход между близкими плотными упаковками [54], также сопровождаемый резким ( $p \approx 19\%$ ) уменьшением металлического радиуса иона. Оба эти примера подтверждают правомерность объяснения аномального хода кривых плавления лантанидов в рамках модели двухкомпонентной жидкости (см. ранее) и свидетельствуют о большей степени коллективизации  $f$ -электронов в жидкой фазе, что и приводит к увеличению плотности и уменьшению сжимаемости при плавлении.

В металлах эффекты электронной перестройки или делокализации оболочек выявлены в настоящее время как в динамическом эксперименте по уменьшению сжимаемости новой фазы [47–49], так и в статических условиях по скачкам электросопротивления [77] и по изменению структурных характеристик кристалла [58]. Электронные фазовые переходы явились также объектом исследований многочисленных теоретических работ [52, 53, 78–86], использующих методы зонной теории (см. гл. 5). Результаты расчетов позволили дать правильное объяснение наблюдаемым экспериментально эффектам и подтвердили общую тенденцию перестройки электронной структуры при сжатии к водородоподобному расположению уровней.

Например, выполненный с помощью метода линейных МГ-орбиталей расчет зонной структуры лантана [52] показал наличие  $6s$ – $5d$ -электронного перехода и количественное совпадение места его завершения с экспериментально зафиксированным уменьшением ударной сжимаемости (см. рис. 3.6). При этом оказалось, что повышение температуры сглаживает эффекты перехода за счет расширения энергетических полос. Отметим, что в работе [87] исследованы также особенности электронных характеристик металлов вблизи особой точки электронного перехода, вызванного изменением топологии поверхности Ферми под давлением.

Интересным теоретическим результатом является описание процесса делокализации  $f$ -электронов при сжатии лантанидов и актинидов. Проведенный

для церия расчет [53] показал, что при уменьшении плотности  $4f$ -полоса сужается и при этом происходит ее расщепление на два состояния, соответствующее различным поляризациям спина. Это отвечает переходу  $4f$ -электрона из металлического состояния в локализованное и соответствует хорошо изученному экспериментально [58]  $\gamma$ - $\alpha$ -переходу, сопровождающемуся появлением у  $\gamma$ -фазы антиферромагнетизма. Подчеркнем, что при низких температурах этот переход является чисто моттовским, а не  $f$ - $d$ -переходом, поскольку расчеты [88] показали, что в  $\alpha$ -фазе электронная конфигурация  $4f^1 (5d6s)^3$  энергетически более выгодна, чем  $(5d6s)^4$ , и кроме того, она дает существенно лучшее совпадение расчетных величин с экспериментально наблюдаемыми значениями энергии перехода и модуля объемного сжатия. Однако при надкритических температурах различие между процессом делокализации  $f$ -электрона и  $f$ - $d$ -электронным переходом становится, по всей видимости, достаточно условным. Результаты расчетов методом линейных МТ-орбиталей дали также количественное описание резкому изменению магнитных свойств переходных металлов при температурах выше точки Кюри, что объясняется предпочтительностью, из-за уменьшения энергии, состояний с неполяризованным спином при переходе [82].

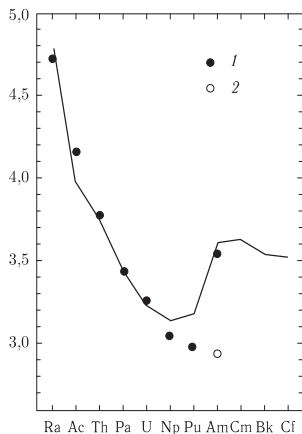


Рис. 8.13. Сравнение экспериментальных и расчетных (1) значений атомного радиуса актиноидов [85, 86]. 2 — расчет для америция без учета локализации  $5f$ -электронов

Делокализация  $f$ -электронов при сжатии зависит от атомного номера, примером чего служит ряд актиноидов. На рис. 8.13 представлены экспериментальные и расчетные значения равновесных атомных радиусов актиноидов [85, 86]. Видно, что у начальных элементов ряда имеется полное соответствие экспериментальных и расчетных данных, которое, однако, начинает нарушаться у нептуния и плутония. Для этих элементов усиливается роль корреляционных эффектов, и уже при небольшом отрицательном давлении становится выгодным решение с поляризованным спином, которое для америция является оптимальным и при нормальных условиях. Америций, таким образом, является первым в ряду актиноидов элементом с локализованными  $5f$ -электронами, проявляющим характерные для редкоземельных элементов свойства. Проведенные расчеты

показали [85, 86], что при сжатии америция, аналогично случаям церия и празеодима, должен произойти процесс делокализации  $5f$ -электронов, сопровождающийся уменьшением металлического радиуса. Интересно, что выполненные эксперименты [89] действительно подтвердили это и, хотя

скачок объема при переходе оказался меньше теоретически предсказанного [85, 86], фаза высокого давления имеет малосимметричную структуру  $\alpha$ -фазы урана, наблюдаемую также и у  $\alpha'$ -фазы церия. Можно ожидать, что и следующие за америцием актиноиды должны при сжатии переходить в характерные для начальных элементов ряда экзотические структуры с низкими координационными числами.

Температура так же, как и давление, может оказывать сильное влияние на характер состояний  $f$ -электронов. Плутоний и нептуний при нормальных условиях имеют делокализованные  $5f$ -электроны, однако уже при небольшом увеличении объема происходит их переход в локализованное состояние [85, 86]. Учитывая аномально большой коэффициент объемного расширения плутония и нептуния, а также определяющую роль гибридизации  $s$ - $d$ -полос в формировании  $\beta$ -фазы нептуния [72], авторы [90] приходят к выводу, что в высокотемпературных твердых фазах этих металлов осуществляется процесс локализации  $5f$ -электронов, который и объясняет наблюдаемые аномалии их свойств.

Электронные фазовые переходы возникают также вследствие выдавливания при сжатии внутренних электронных оболочек из дискретного спектра в непрерывный, что, согласно [91], соответствует фазовому превращению первого рода. Естественно, что такой электронный фазовый переход является целой серией фазовых превращений, сводящихся к ионизации давлением последовательности электронных оболочек. Оценка параметров подобных фазовых переходов методами квазиклассической теории (см. гл. 6) и расчеты прямыми квантовомеханическими способами (см. гл. 3) дают значения давлений, существенно превышающие 300 Мбар, что затрудняет экспериментальную проверку этих предсказаний. Возможно, что данные переходы ответственные за появление аномалий на зависимости «масса-радиус» белых карликов [91].

### **8.3. Высокотемпературное кипение**

Интересными особенностями обладают фазовые превращения в неупорядоченных структурах, где конкуренция в межчастичном взаимодействии сил притяжения и отталкивания приводит к переходу жидкость-пар, заканчивающемуся критической точкой. Характеристики кривых кипения и параметры критических точек измерены у значительного числа химических соединений и содержатся в обширной справочной литературе. Особой тщательностью характеризуются эксперименты в околкритической области, где данные по критическим индексам, пространственно-временным флуктуациям, кинетическим коэффициентам и т. п. служат основой для построения современных теорий критических явлений [56]. Сведения о положении кривых кипения большинства химических элементов в настоящее время являются, однако, достаточно ограниченными. Так, например, из всех металлов, составляющих около 80 % элементов Периодической системы, параметры критической точки определены лишь у трех наиболее легкокипящих [92], не говоря уже о более подробном исследовании фазовой границы, а также околкритических и в особенности сверхкритических состояний.

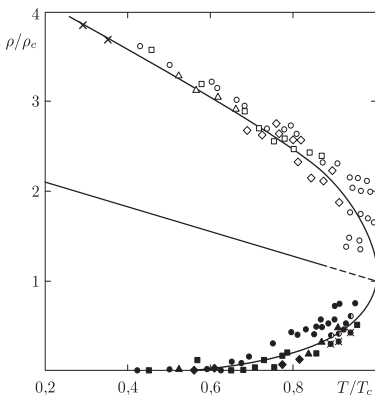


Рис. 8.14. Кривая сосуществования жидкость-пар щелочных металлов [92]

Параметры критических точек элементов могут быть оценены по табличным значениям теплот, температур и плотностей на линии равновесия жидкость-пар с использованием термодинамической аналогии в их свойствах (рис. 8.14). Подробное изложение принципов термодинамического подобия и полученные по различным методам оценки параметров критической точки большинства элементов приведены в работах [92, 93]. В целом разные методы оценок дают сходные результаты, хотя количественное различие в численных значениях критических параметров достигают иногда 30–50%. Близкие значения получаются также в рамках модельных уравнений состояний (см. гл. 9) и независимым образом подтверждаются данными экспериментов по адиабатическому расширению ударно-сжатых металлов [94] и медленному электровзрыву металлических проволочек [94–97]. В главе 9 представлены результаты экспериментов по адиабатическому расширению ударно-сжатого урана (рис. 9.5).

Изломы на адиабатах разгрузки отмечают место вхождения изэнтроп  $S$  в двухфазную область кипения, а пунктиры соответствуют метастабильным состояниям на изэнтропах  $S$ . Использование этих экспериментальных данных дают возможность уточнить положение кривой высокотемпературного кипения металлов, и в рамках полуэмпирических УРС (гл. 9) сделать выводы о положении критических точек металлов.

Соответствующие данные по параметрам критических точек [99, 100] приведены в табл. 8.1.

Существенной особенностью испарения металлов является то обстоятельство, что вследствие значительных критических температур, сравнимых с соответствующими потенциалами ионизации, высокотемпературная часть кривой кипения находится в плазменной фазе, которая ввиду больших зна-

чений критических плотностей (см. табл. 8.1) является сильнонеидеальной по отношению к широкому спектру межчастичных взаимодействий. Таким образом испарение металлов при высоких давлениях происходит непосредственно в плазменную фазу, минуя, в отличие от легкокипящих веществ, газовую область. Это может исказить существующие оценки фазовой границы кипения и дополнительно привести к появлению новых фазовых границ.

Таблица 8.1. Критические параметры металлов

Элемент	$T_c$ , К	$\rho_c$ , $10^8$ Па	$\rho_c$ , г/см <sup>3</sup>	$S_c$ , кал·моль <sup>-1</sup> К <sup>-1</sup>
Zr	16250	7,52	1,79	40,45
Zn	3196	2,63	2,29	31,27
Y	10800	3,74	1,30	38,92
Yb	4280	1,38	2,36	36,92
V	12500	10,78	1,86	37,26
U	11630	6,11	5,30	43,07
W	21010	15,83	5,87	43,34
Ti	11790	7,63	1,31	37,92
Sn	8200	3,35	2,05	39,44
Th	14950	4,88	3,21	43,67
Tu	5910	2,65	3,22	38,52
Tl	4470	1,63	3,16	38,67
Tb	8060	3,08	2,57	42,34
Te	1850	0,75	2,21	35,22
Ta	20570	13,5	5,04	43,07
Sr	3860	0,90	0,86	35,23
Ag	7010	4,50	2,93	36,86
Se	8350	4,08	0,93	36,82
Sm	5340	2,10	2,51	40,62
Ru	15500	13,74	3,79	37,14
Rh	13510	11,23	3,62	39,66
Re	19600	15,7	6,32	43,42
Ra	3830	0,77	1,93	38,32
Pr	9160	2,85	1,86	41,39
Tc	15930	11,81	3,09	41,00
Pa	12650	4,82	3,72	43,34
Po	2050	0,62	2,67	37,52
Pt	14330	8,70	5,02	41,8
Pd	10760	7,64	3,20	36,64
Os	17110	14,49	6,83	42,60
Nb	19040	12,52	2,59	41,65
Ni	10330	9,12	2,19	36,50
Nd	7920	2,65	2,05	41,33
Mo	16140	12,63	3,18	41,21

Продолжение табл. 8.1.

Элемент	$T_c$ , К	$p_c$ , $10^8$ Па	$\rho_c$ , г/см <sup>3</sup>	$S_c$ , кал·моль <sup>-1</sup> К <sup>-1</sup>
Lu	7060	2,84	2,97	39,41
Fr	1810	0,12	0,65	39,50
Bi	4200	1,26	2,66	40,2
Hg	1763±15	1,51±0,025	4,2±0,4	33,790
Hg	1753±10	1,52±0,01	5,7±0,2	33,241
Na	2573	0,275	0,206	31,683
K	2223	0,152	0,194	33,931
Rb	2093	0,159	0,346	36,485
Cs	2057±40	0,144	0,428±0,012	38,111
Li	3223	0,689	0,105	27,666
Mn	5940	6,28	2,46	35,68
Mg	3590	1,98	0,56	29,48
Pb	4980	1,84	3,25	39,81
La	11060	3,35	1,78	40,58
Fe	9600	8,25	2,03	37,20
Ir	15380	12,78	6,77	41,91
In	6120	2,43	1,84	37,95
Ho	7240	2,94	2,84	40,63
Hf	18270	9,38	3,88	42,59
Au	8970	6,10	5,68	39,40
Ge	9170	4,90	1,64	37,77
Ga	7210	4,31	1,77	35,91
Gd	8670	3,25	2,50	42,79
Er	8250	3,34	2,86	40,51
Eu	4680	1,21	1,67	41,36
Dy	7240	2,91	2,76	41,05
Cu	8390	7,46	2,39	35,30
Co	10460	9,23	2,20	37,12
Cr	9620	9,68	2,22	37,35
Ce	8860	3,03	2,03	40,51
Ca	4180	1,21	0,49	32,70
Cd	2790	1,60	2,74	33,20
Be	8080	11,70	0,55	27,02
Ba	4100	0,81	1,15	37,06
Al	8000	4,47	0,64	33,52
Sb	2570	1,30	2,61	36,1
B	8200	9,57	0,69	28,9
Se	1010	0,37	1,60	31,8
S	730	0,30	0,72	27,7

## 8.4. Плазменные фазовые переходы

Как мы видели (гл. 4), для качественного описания физических свойств неидеальной плазмы широко используются эвристические модели, основанные на экстраполяции развитых для слабонеидеальной плазмы представлений о коллективных и квантовых эффектах при кулоновском взаимодействии. Характерно, что некоторые из этих моделей в области повышенных неидеальностей теряют термодинамическую устойчивость, что связывается [10, 101, 102] с возможностью фазового перехода первого рода и расслоением сильносжатой кулоновской системы на фазы различной плотности [103].

Модельный анализ сильносжатых кулоновских систем приводит к возможности образования электронного кристалла Вигнера, изучению которого посвящено значительное количество теоретических [104], а поиску — экспериментальных [49, 105] работ (см. гл. 4). Возможности аномалий в термодинамических функциях при металлизации плотных паров металлов обсуждалось в работе [106], где предсказано, что наряду с кривой кипения обычного вида возможны вызванные металлизацией дополнительные фазовые переходы в газовой и жидкой фазах.

Здесь, по-видимому, уместно отметить общую склонность сильносжатых кулоновских систем к пространственному упорядочению [107, 108] — фазовому переходу с образованием плазменных жидкостей и кристаллов. К настоящему времени такого рода кулоновские кристаллы наблюдались в ряде экзотических экспериментальных ситуаций: в неидеальной «пылевой» [109] и коллоидной [110] плазме, в охлажденных лазерным излучением ионных сгустках в электростатических ловушках [111] и циклотронных ускорителях [112], а также в двумерном электронном газе на поверхности жидкого гелия [64, 113].

Рассмотрим ряд плазменных фазовых переходов [114, 115].

Плазменный фазовый переход, впервые изученный Норманом и Старостиным [101, 116], описывает переход из состояния слабоионизованной плазмы в состояние плазмы высокой степени ионизации.

В работе [114] были развиты два подхода для получения уравнения состояния плотной водородной плазмы. Оба они используют аппроксиманты Паде и химическую модель (PACH), но по-разному учитывают взаимодействие заряженных и нейтральных частиц. Первая модель получила название PACH-DE («density-dependent energy levels»). Вторая модель получила название PACH-EV («excluded volume»). Вкратце: отличие между двумя подходами состоит в том, что PACH-DE включает в себя взаимодействие заряженных и нейтральных частиц с помощью зависящих от плотности энергетических уровней, а PACH-EV учитывает соответствующие эффекты путем вириального разложения. Оба уравнения состояния обеспечивают реалистичное описание для низких (нейтральный флюид) и высоких (полностью ионизированная плазма) температур. Термодинамические неустойчивости появляются в промежуточной области, связанной с фазовым переходом первого ряда или мягким переходом первого ряда.

По сравнению с предыдущими подходами [117–122], подходы PACH и HACH-DE позволяют более систематично учитывать корреляции в плотном нейтральном компоненте, а также взаимодействие заряженных и нейтральных частиц, выходя за рамки таких приближенных методов, как модель твердых сфер или теория возмущений.

На рисунках 8.15 и 8.16, полученных по модели PACH-EV показана область перехода, в которой сосуществуют две фазы; область сосуществования является достаточно узкой. Экспериментальная точка, в которой была зарегистрирована [123] металлоподобная проводимость, лежит выше линии сосуществования, что соответствует полученному результату со значительной ионизацией в этой области.

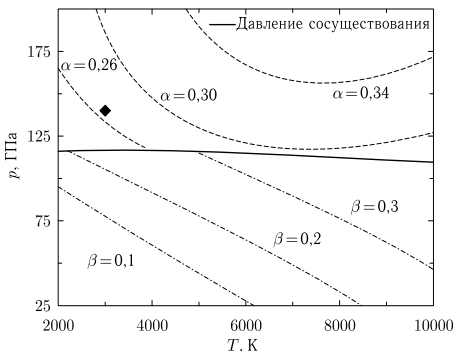


Рис. 8.15. Давление на линии сосуществования и линии постоянной степени диссоциации  $\beta$  и ионизации  $\alpha$ , соответственно, в зависимости от температуры. Расчеты проведены на основе PACH-EV и BERO-НО. Условия, при которых наблюдается металлоподобная проводимость, обозначены ромбом [123]

Другое уравнение состояния, построенное на основе метода исключенного объема [114], исходит из выражения свободной энергии двухкомпонентной системы, состоящей из нейтральных и заряженных частиц. Свободная энергия такой системы складывается из вкладов со стороны нейтральных ( $F_{nl}$ ) и заряженных ( $F_{pl}$ ) частиц, каждый из которых расщепляется на идеальную составляющую и составляющую взаимодействия.

Энергетические уровни считаются не зависящими от плотности, а взаимодействие между зарядами и нейтральными частицами учитывается с помощью концепции приведенного объема [114]. Данный подход носит название PACH-EV; для расчетов используется программный пакет BERO-НО.

В этой модели также содержится плазменный фазовый переход (ПФП) (рис. 8.17). В области сосуществования, где температура выше 10000 К, плазма состоит из двух фаз: I и II, которые отличаются по массовым плотностям примерно на  $0,2 \text{ г/см}^3$ . Плотности сосуществования фаз  $\rho_I$  и  $\rho_{II}$

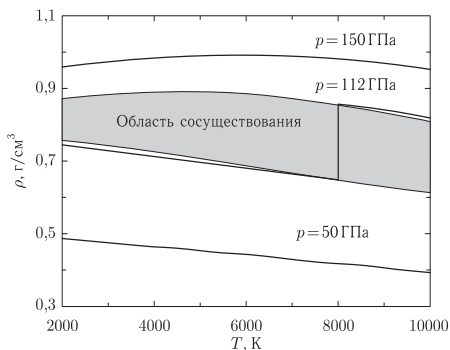


Рис. 8.16. Область сосуществования и три изобары в зависимости от температуры (рассчитанные на основе PACH-EV и BERO-HO) [123]

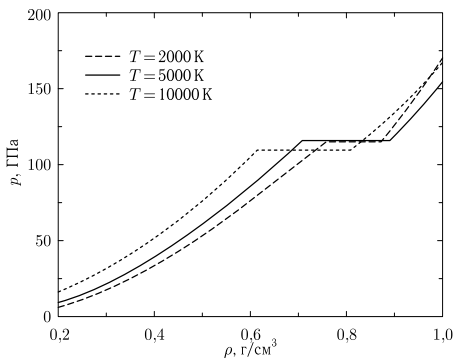


Рис. 8.17. Зависимость давления от плотности (в  $\text{г/см}^3$ ) для трех значений температуры. В области неустойчивости мы воспользовались построением Максвелла, в результате чего получили постоянное давление в области сосуществования. Расчеты выполнены с помощью программных пакетов BERO-EV и BERO-HO

уменьшаются с увеличением температуры. ПФП характеризуется скачком массовой плотности, степени ионизации и степени диссоциации. Для рассматриваемого нами температурного диапазона фаза I соответствует почти неионизированному атомно-молекулярному флюиду, тогда как фаза II — частично ионизированной плазме. Давление перехода уменьшается с увеличением температуры и варьируется в пределах от 120 ГПа до 110 ГПа для температурного диапазона  $T = (2-10) \cdot 10^3$  К. На рис. 8.15 показана соответствующая линия

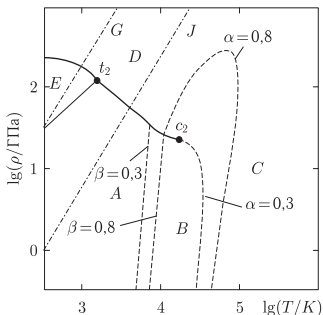


Рис. 8.18. Фазовая диаграмма водорода со второй критической точкой  $c_2$  и линией сосуществования  $c_2 - t_2$  [122]. *A*: область жидкого молекулярного водорода. *B*: область слабо ионизованной плазмы. *C*: область сильно ионизованной плазмы. *D*: область металлического водорода. *E*: оценка для области твердого молекулярного водорода. *G*: оценка для ударной адиабаты [124]. *J*: оценка для адиабаты Юпитера [125]

сосуществования  $p^{\text{ПП}}(T)$  двух фаз, а также линии постоянной степени ионизации и диссоциации.

Модель [122], учитывающая кулоновское взаимодействие в рамках Паде-аппроксимации и взаимодействие нейтралов, приводит к плазменному переходу (рис. 8.18) с критической точкой  $c_2$ :  $T_c = 16500$  К,  $p_c = 22,8$  ГПа,  $\rho_c = 0,13$  г/см<sup>3</sup>,  $\alpha_c = 0,32$ ,  $\beta_c = 1$ .

На рисунке 8.18 [122] изображена критическая точка плазменного фазового перехода, линия сосуществования и другие характеристические линии. Прямые  $\alpha = \text{const}$  и  $\beta = \text{const}$  связывают состояния, характеризующиеся равной степенью ионизации и диссоциации, соответственно. Вблизи критической точки  $c_2$  происходит резкое изменение состава плазмы. Также мы видим, что две сосуществующие фазы вблизи критической точки ионизированы лишь частично. При низких температурах рядом могут сосуществовать молекулярный газ и металлическая жидкость. Область твердого молекулярного водорода мы взяли из работы Керли [126]. В тройной точке,

$$T_T \approx 1500 \text{ К}, \quad p_T \approx 100 \text{ ГПа},$$

могут сосуществовать три фазы (металлическая жидкость, твердый молекулярный водород и жидкий молекулярный водород).

Сравним полученные результаты с критическими данными, рассчитанными Франком [127] или Робником и Кундтом [125]:

$$T_c = 19000 \text{ К}, \quad p_c = 24 \text{ ГПа}, \quad \alpha = 0,5, \quad \beta_c = 1,$$

а также с ранними оценками Эбелинга и Сэндига [128]:

$$T_c = 12600 \text{ К}, \quad p_c = 94 \text{ ГПа}, \quad \rho_c = 1 \text{ г/см}^3, \quad \alpha = 0,008, \quad \beta_c = 1.$$

Можно видеть, что оценки совпадают по порядку величины. Заметим однако, что критические данные сильно зависят от выбранного приближения, поэтому необходимо дальнейшее совершенствование теории.

В работе других исследователей [101] содержится иной расчет линии сосуществования и критической точки. Они применили усовершенствованную модель уравнения состояния, основанную на реалистичных значениях по-

тенциалов при взаимодействии нейтральных частиц, и получили следующие данные:

$$T_c = 15000 \text{ К}, \quad p_c = 65 \text{ ГПа}, \quad \rho_c = 0,36 \text{ г/см}^3.$$

Более того, в рамках данной модели фаза за пределами линии сосуществования не является полностью ионизованной («металлической»), а характеризуется умеренной ионизацией.

В различных моделях угол наклона линии сосуществования либо положительный [119, 125, 129], либо отрицательный [101, 122]. В общем случае, угол наклона линии перехода подчиняется закону Клаузиуса–Клапейрона:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta s}{\Delta v}, \quad (8.6)$$

где  $\Delta s$  и  $\Delta v$  — разность значений удельной энтропии и удельного объема для двух фаз. С феноменологической точки зрения, отрицательный угол наклона линии сосуществования в плазменном фазовом переходе более логичен, поскольку при пересечении линии сосуществования с линией сжатия происходит увеличение энтропии [130].

Но самое важное, на что стоит обратить внимание, это резкое снижение давления при переходе в фазу металлического водорода, по сравнению с соответствующим давлением перехода в твердое состояние, которое ожидается в диапазоне выше 200 ГПа [126, 131–134]. Предполагается, что при переходе из фазы жидкого молекулярного водорода в фазу жидкого металлического водорода давление будет в 10 раз меньше, чем при переходе из фазы твердого молекулярного водорода в фазу твердого металлического водорода.

Фазовая диаграмма (рис. 8.19) иллюстрирует большое количество предсказаний плазменного фазового перехода для этого момента. В конце данной главы мы обсудим экспериментальные свидетельства этого эффекта.

Опираясь на работы [142–144], отразим на фазовых диаграммах последовательность фазовых переходов (рис. 8.20, 8.21, 8.22 и 8.23). Они в гелиевой плазме соответствуют ступеням ионизации  $\text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+$  и  $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$ .

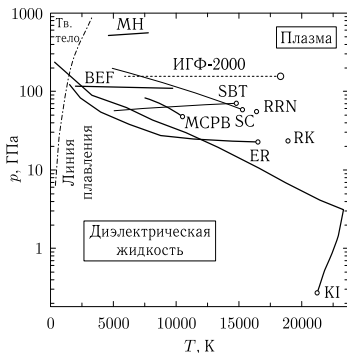


Рис. 8.19. Фазовая  $p$ - $T$ -диаграмма водорода с различными вариантами теоретически предсказанных «плазменных фазовых переходов» (ПФП). (Рисунок из работы [135], дополненный результатами настоящих расчетов.) Обозначения: RK — [125]; ER — [122]; МН — [129]; SC — [101]; SBT — [136]; RRN — [137]; MCPB — [138]; KI — [139]; BEF — [140]; ИГФ — [141]

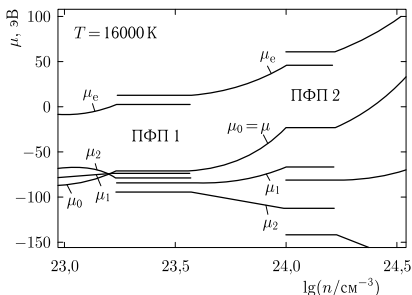


Рис. 8.20. Химические потенциалы атомов (индекс 0), однозарядных (индекс 1) и двухзарядных (индекс 2) ионов, электронов (индекс e) гелиевой плазмы.  $\mu$  — суммарный химический потенциал. Температура 16000 К

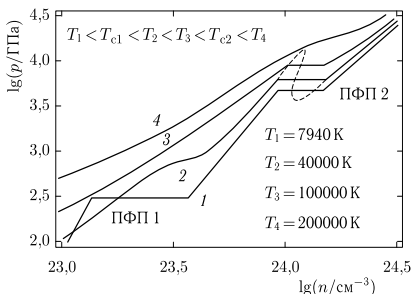


Рис. 8.21. Изотермы давления для докритических и сверхкритических температур при двух фазовых переходах гелиевой плазмы. Для одной из температур фазовый переход обозначен петлей Ван-дер-Ваальса (пунктирная линия)

В таблице 8.2 содержатся данные о системе в критических точках, а также оценочные данные на кривой плавления.

Таблица 8.2. Критические и тройные точки, соответствующие фазовым переходам гелиевой плазмы [195]

	$T/10^3 \text{ K}$	$n/10^{23} \text{ см}^{-3}$	$p/\text{ГПа}$	$\bar{z}$
$C_1$	35	3,3	0,66	0,8
$C_2$	120	13	10	1,8
$Tr_3$	1		0,2	0 $\rightarrow$ 1
$Tr_4$	4		3	1 $\rightarrow$ 2

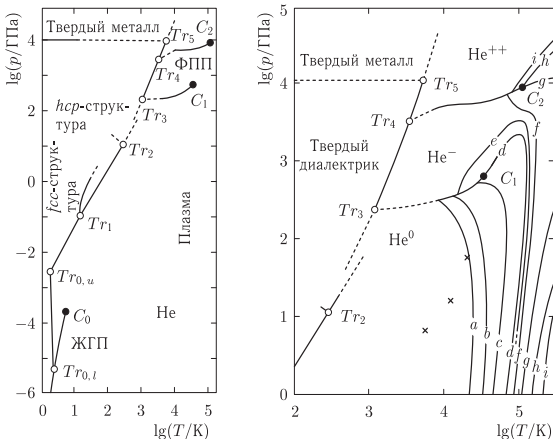


Рис. 8.22. Фазовые диаграммы гелия-4 в плоскости давление–температура.  $Tr$  – тройные точки: индексы  $0, l$  и  $0, u$  – нижняя и верхняя  $\lambda$ -точки; индексы: 1 – hcr-структура/fcc-структура/газ; 2 – fcc-структура/hcr-структура(?) /газ; 3 – твердый гелий/ $He^+$ / $He^0$  (ПФП 1); 4 – твердый гелий/ $He^{++}$ / $He^+$  (ПФП 2); 5 – твердый диэлектрик/твердый металл/ $He^{++}$ .  $C$  – критические точки, индексы: 0 – переход жидкость–газ (ЖГП); 1 – ПФП 1; 2 – ПФП 2. Сплошные линии – фазовые переходы (пунктиром показаны экстраполяции). Линии с буквами – линии постоянного среднего заряда тяжелых частиц  $\bar{z}$ :  $a$  – 0,01;  $b$  – 0,1;  $c$  – 0,5;  $d$  – 0,9;  $e$  – 1,0;  $f$  – 1,1;  $g$  – 1,5;  $h$  – 1,9;  $i$  – 1,99. Ударноволновой эксперимент:  $\times$  – прямая волна [195]

Явление металлизации гелия интенсивно изучалось для случая твердого гелия при низких температурах. Особое внимание уделялось давлению металлизации. На основе расчетов зонной структуры были получены следующие значения давления металлизации: 20 ТПа [145], 3 ТПа [146], 11,2 ТПа [147] и 11,0 ТПа [148]. Аналогично случаю водородной плазмы, для гелиевой плазмы характерно значительное снижение давления при переходе к металлической плазме.

Расчеты показывают, что в узком диапазоне плотностей (порядка  $10^{23}$  частиц на  $см^3$ ) при  $T = 30000$  К наблюдаются два минимума свободной энергии, т. е. существует два значения степени ионизации. Это говорит о термодинамической неустойчивости,

$$\left[ \frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho} \right]_T < 0, \quad (8.7)$$

где  $\rho$  – массовая плотность. Термодинамическая нестабильность ведет к фазовому переходу в водородно-гелиевой плазме при достижении критической

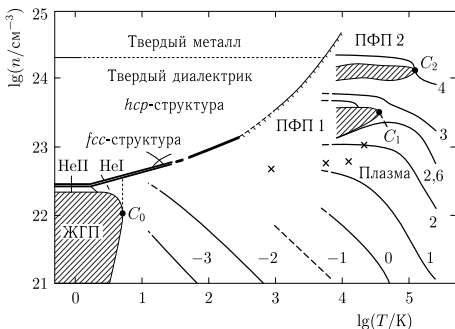


Рис. 8.23. Фазовая диаграмма гелия-4 в плоскости плотность–температура. Области фазовых переходов первого порядка заштрихованы: ЖГП — переход жидкость–газ; П — зона плавления; ПФП 1 и ПФП 2 — два плазменных фазовых перехода, соответствующие ступеням ионизации  $\text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+$  и  $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$ . Тонкими линиями показаны изобары. Звездочками отмечены ударноволновые точки (см. рис. 8.22)

температуры  $T \approx 25\,000$  К. Напомним, что для случая чисто водородной плазмы критическая температура была равна  $T_c = 16\,500$  К [122, 149].

Снова видим, что двукратная ионизация вызывает неустойчивость и фазовые переходы [150]. Вследствие относительно высокой электронной плотности энергия ионизации иона гелия резко уменьшается, в результате чего двукратная ионизация оказывается более предпочтительной, чем можно было бы предположить на основе теории идеальной плазмы.

Напомним, что в рамках динамической теории звезд [107, 108], помимо нарушений равновесия, фигурирующих в уравнении (8.7), представляют интерес и другие неустойчивости, например,

$$\left[ \frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho} \right]_S < \frac{4}{3}. \quad (8.8)$$

Справедливо ли наше уравнение состояния в условиях подобного рода неустойчивостей, предстоит выяснить в дальнейшем.

Прототипом водородно-гелиевой плазмы можно считать внутрисолнечное вещество (см. п 4.5). С точки зрения физики плазмы, Солнце представляет собой большой плазменный шар, который можно рассматривать как гигантскую лабораторию по изучению плазмы в широком диапазоне термодинамических параметров. Например, в центре Солнца, где температура превышает  $10^7$  К, плотность плазмы очень высока (более  $10^{25}$  частиц на  $\text{см}^3$ ), а ближе к периферии, где температура опускается ниже  $10^4$  К, плазма является очень разреженной. Для приближенного физического рассмотрения мы моделируем Солнце следующим образом: Солнце — это плазменный шар, который в молярных долях на 90–93% состоит из водорода, на 6–8% — из гелия и менее чем на 2% — из более тяжелых частиц. Считается, что плазменный

шар находится в состоянии механического и термодинамического равновесия, распределение температуры и плотности вдоль радиуса известно. Гидродинамическими потоками и отличными от излучения явлениями переноса будем пренебрегать. Однако будем учитывать неравновесность вследствие ядерных реакций, реакций ионизации и радиационных переходов. С физической точки зрения, поглощаемое и переизлучаемое Землей солнечное излучение выступает в качестве движущей силы всех процессов самоорганизации на нашей планете. Так называемая «фотонная фабрика» обеспечивает Землю энтропией, необходимой для поддержания и развития жизни, человечества, науки и культуры. Можно легко оценить поток энтропии, поступающий от системы Солнце–Земля, в фоновом излучении, если предположить, что в среднем  $230 \text{ Вт/м}^2$  поглощается и переизлучается поверхностью Земли. Считая, что температура поступающих фотонов около  $5800 \text{ К}$ , а Земля излучает тепло точно так же, как черное тело с температурой  $260 \text{ К}$ , получаем значение потока энтропии, равное  $1 \text{ Вт/(м}^2 \text{ К)}$ . Очевидно, что любое существенное изменение данных показателей приведет к драматическим последствиям, которые скажутся на условиях жизни на нашей планете.

Поскольку Солнце играет основополагающую роль в нашей жизни, это является сильнейшей мотивацией для роста количества специалистов, снабжающих астрофизиков инструментарием для изучения процессов внутри Солнца. Мы рассматривали вопрос о термодинамике солнечной плазмы в п. 4.5.

Если продолжить астрофизическую тематику, то следует отметить, что на протяжении многих лет проблема существования или отсутствия фазовых переходов (ФП) в недрах Юпитера (J), Сатурна (S) и коричневых карликов (BD) является одной из центральных в теории эволюции этих объектов (см. обзор [151]) [152–158] и др.) В последнее десятилетие к ним прибавился многочисленный отряд так называемых «внесолнечных» планет-гигантов (EGP — extrasolar giant planets, напр. [157]) Все эти объекты представляют собой в основном гелий-водородную смесь ( $\approx 25\% \text{ He}$  по весу) с небольшими добавками тяжелых составляющих, пробегающую диапазон состояний от горячей сверхплотной плазмы в центре ( $p \approx 1000 \text{ ГПа}$ ,  $T \approx 10 - 100 \text{ кК}$ ) до относительно холодного гелий-водородного флюида на поверхности ( $p = 1 \text{ бар}$ ,  $T \approx 100 - 1000 \text{ К}$ ). Фазовые переходы в такой смеси делятся на два типа. (А) — расслоения на фазы различной химической пропорции из-за ограниченной взаимной растворимости плотного водорода и гелия. По самому определению этот тип ФП в принципе не существует в чистом водороде или гелии. (В) — фазовые переходы, уже существующие в водороде или гелии о которых мы уже говорили, трансформируемые в условия смеси. В течение многих лет главным переходом такого типа (В) являлся так называемый «плазменный фазовый переход» (ПФП). Со времени пионерской работы [116] как в водороде, так и в гелии было предсказано много вариантов ПФП, получаемых, как правило, в рамках далекой экстраполяции какого-либо модельного описания неидеальности (см. [136, 140, 159–162] и др.). Главной отличительной чертой ПФП как мы видели выше является скачок равновесной степени ионизации. Причем в гелии некоторые модели [159] предсказывают не один, а два ПФП — по одному на каждую степень ионизации. Другие же модели [161] напротив, предсказывают единый ПФП, но с двукратной ионизацией He

$\Leftrightarrow \text{He}^{(++)} + 2e$ . В последнее десятилетие предсказания ПФП «плазменного» типа были существенно поддержаны категорическим утверждением самого факта существования ПФП в рамках так называемых строгих первопринципных подходов (СПП) методом квантового Монте-Карло (Path Integral Monte-Carlo — PIMC [163–165]).

Помимо ПФП также в рамках других вариантов строгих первопринципных подходов (т.н. метод функционала плотности для электронов и метод молекулярной динамики для ядер — /DFT+MD/) недавно было предсказано [166–168] существование в водороде еще одного, «диссоциативного» фазового перехода (ДФП). Отличительной чертой таких ДФП является скачок равновесной степени диссоциации молекулы  $\text{H}_2$ . Буквально в последнее время утверждения были поддержаны еще одним вариантом первопринципных подходов (т.н. «метод волновых пакетов» для электронов и молекулярной динамики для ядер — /WRMD/) также предсказавшим аномалию типа фазового перехода со скачкообразной диссоциацией водорода [169, 170]. Следует отметить, что идея такого типа ФП обсуждалась еще в [171, 172] и модельно развивалась в [173].

На рис. 8.24 и 8.25 представлены фазовые диаграммы ксеноновой плазмы совместно с данными динамических экспериментов.

Плазма инертных газов во многом проявляет себя как водородная плазма, если ионизован лишь один электрон. В частности, это связано с их относительно высокой энергией ионизации. Непосредственно из этого следует возможность существования двух различных критических точек. В первой критической точке, соответствующей переходу газ-жидкость, данные о системе хорошо известны (в пределах  $10^1 \div 10^2$  К и  $10^5 \div 10^7$  Па). Предполагается, что вторая критическая точка должна находиться в пределах области сильного взаимодействия (около  $10^4 \div 10^5$  К и  $10^9 \div 10^{11}$  Па). Соответствующий ей фазовый переход является фазовым переходом первого рода и сопровождается резким изменением массовой плотности и степени ионизации. Этот плазменный фазовый переход (ПФП) является, так сказать, высокотемпературной модификацией хорошо известного перехода диэлектрик-металл.

Среди благородных газов ксенон является главным претендентом на плазменный фазовый переход. Результаты экспериментов по статическому сжатию при низких температурах доказывают, что переход диэлектрик-металл происходит при давлении выше 100 ГПа. Росс и МакМахан [175] провели необходимые расчеты и пришли к выводу, что переход происходит при давлении около 130 ГПа. Точная фазовая диаграмма для ксенона при высоких температурах на сегодняшний день еще не построена.

На рис. 8.24 и 8.25 показана возможная форма фазовой диаграммы ксенона, которая была построена на основе одноэлектронной теории [130, 174]. Ударно-волновые данные получены в различных экспериментах по сжатию из жидкого (N) и газообразного состояний (F). Данные (N) [176, 177] пересекают область нестабильности ПФП, а данные (F) [178, 179] лежат за ее пределами, что соответствует исходно низкой плотности.

Термодинамические свойства ксенона, описанные в литературе на сегодняшний день, не дают ясного указания на фазовый переход. Можно ли действительно говорить в данном случае о плазменном фазовом переходе,

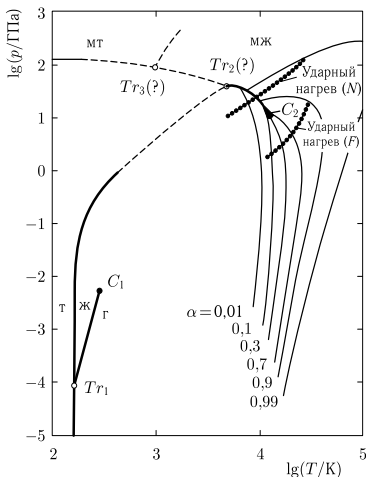


Рис. 8.24. Фазы ксенона в плоскости давление–температура, в рамках водородоподобной модели [130, 174]. Толстыми линиями обозначены фазовые переходы первого рода.  $Tr_1$  — тройная точка между твердой (т), жидкой (ж) и газообразной (г) фазами.  $C_1$  — критическая точка для перехода жидкость–газ.  $C_2$  — критическая точка для плазменного фазового перехода. Пунктирными линиями показаны возможные дополнения к фазовой диаграмме:  $Tr_2$  — тройная точка между фазами твердого диэлектрика, жидкого диэлектрика и металлической жидкости (мж);  $Tr_3$  — тройная точка между металлической твердой (мт), металлической жидкой фазами и фазой твердого диэлектрика. Тонкими линиями показаны области постоянной степени ионизации  $\alpha = \bar{z}$ . Процесс металлизации при низких температурах описан согласно [175]. Точечным пунктиром обозначены ударные адиабаты, построенные по результатам экспериментов

покажут дальнейшие аккуратные измерения электропроводности или коэффициента отражения ксенона.

Рассмотрим эксперименты по квазиадиабатическому сжатию водорода и дейтерия, стимулированные изучением эффекта металлизации давлением и поисками плазменного фазового перехода [107, 108].

Хорошо известно (рис. 8.26), что вещество может быть переведено в проводящее состояние (ионизовано) либо путем его нагрева, либо путем сжатия [180, 181]. Механизм температурной ионизации является сегодня основным и наиболее хорошо изученным в физике плазмы [181]. Он связан с разогревом разреженной плазмы до температур, сравнимых с потенциалом ионизации вещества  $T \sim J$ . Этот механизм мы рассмотрели в гл. 4. Альтернативный термическому, механизм ионизации давлением связан с сильным сжатием «холодного» вещества до плотностей  $n \sim a_0^{-3}$ , достаточных до



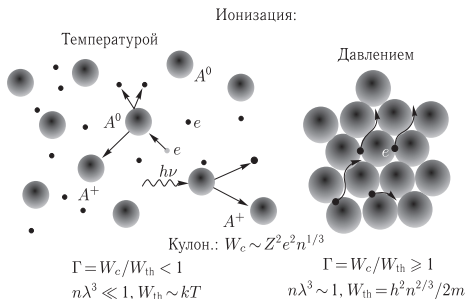


Рис. 8.26. Температурная ионизация и ионизация давлением вещества

Активные исследования уравнения состояния и электропроводности стимулируются важностью плазмы водорода для астрофизики и физики планет-гигантов, а также поиском высокотемпературной сверхпроводимости его металлической фазы. Это является постоянным прагматическим стимулом исследований в последние 50 лет [182] — (рис. 8.26). Опыты по изучению ионизации давлением плазмы водорода и благородных газов были выполнены с использованием техники многократного ударного сжатия, позволяющей осуществить квази-адиабатическое сжатие, существенно (примерно в 10 раз) увеличив тем самым степень сжатия и снизив (до  $4\text{--}5 \cdot 10^3$  К) температуру вещества [123, 183–186]. Опыты проводились в плоской и цилиндрической геометрии на легкогазовых пушках и взрывных метательных устройствах, а также цилиндрических взрывных магнитокумулятивных генераторах [187, 188], использующих мощное магнитное поле для «изэнтропизации» процесса сжатия.

Выполненные в значительном количестве эксперименты показали резкое (до 5–6 порядков) возрастание статической электропроводности водорода в узком диапазоне конденсированных плотностей при мегабарных давлениях (рис. 8.28). При этом максимально достигнутый уровень электропроводности в этих условиях составляет несколько сотен  $\text{Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ , что близко к проводимости щелочных металлов и недалеко от «минимальной металлической» проводимости Иоффе–Регеля [64]. Поэтому обсуждаемый здесь эффект часто называют «металлизацией», что, конечно, не вполне корректно, так как согласно [64, 194] разделить понятие металл и диэлектрик можно только при  $T = 0$ . Нам представляется, что в обсуждаемом случае речь идет об «ионизации давлением» [189, 195], вызванной перекрытием волновых функций соседних атомов, облегчая тем самым их ионизацию в плотной среде. На рис. 8.29 приведены геометрические характеристики молекулы водорода в изолированном состоянии по сравнению с приходящимся на одну молекулу объемом доступного пространства (радиус ячейки Вигнера–Зейтца) при выбранной плотности  $\rho$ . Видно, что при плотности  $\rho > 0,3 \text{ г/см}^3$  молекулы водорода становятся сравнимыми, а затем меньше сферы Вигнера–Зейтца.

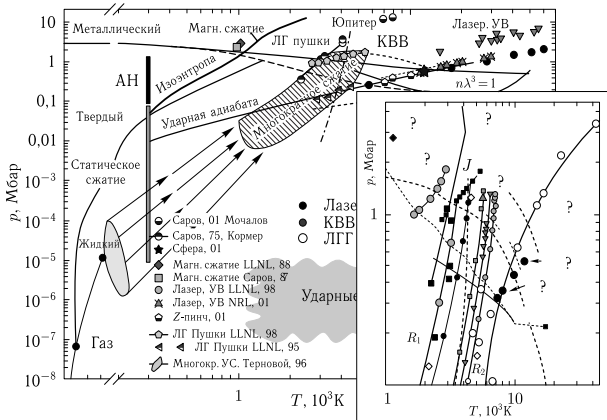


Рис. 8.27. Фазовая диаграмма водорода. Границы плазменных фазовых переходов отмечены пунктиром [189]

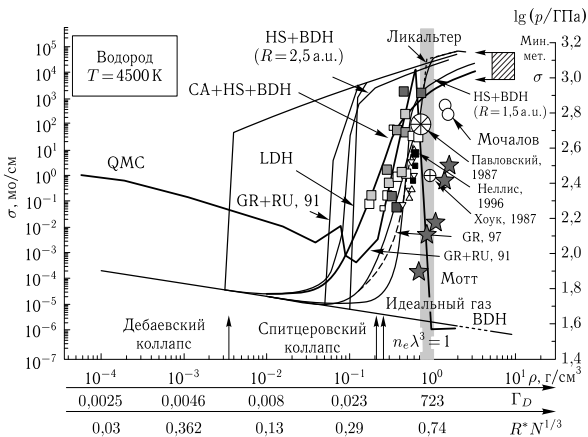


Рис. 8.28. Ионизация давлением неидеальной плазмы водорода [183–188]. Серым выделена область термодинамического фазового перехода, звездочками — результаты измерения плотности методом импульсной рентгенографии [186], QMC — расчеты квантовым методом Монте-Карло [190–193]

Таблица 8.3. Хронология исследований водорода

1766	Кавендиш — открытие «горючего газа» — водорода
1898	Дьюар — жидкий и твердый ( $H_2$ ) водородощелочной металл?
1925	Фаулер — $H_2$ в звездах — плазма
1925	Герцфельд, Клаузиус–Моссотти — диэлектрическая катастрофа при $0,6 \text{ г/см}^3$
1935	Вигнер–Хантингтон — металлизация при 2,5 Мбар, $T = 0 \text{ К}$
1968	Ашкрофт — (теория БКШ) высокотемпературная сверхпроводимость металлического водорода
1972	Кормер и др. — многократное взрывное сферическое сжатие до 4 Мбар
1978	Хоук и др. — взрывное магнитное сжатие до 2 Мбар, 4000 К
1980	Мао, Хемли, Сильвера — статическое сжатие до 1 Мбар
1987	Павловский и др. — взрывное магнитное сжатие до 1 Мбар, 3000 К
1990	Ашкрофт — диссоциация и металлизация при 3 Мбар
1993	Неллис и др. — реверберация ударных волн — «металлизация»
1997	Фортов, Терновой — взрывное квазиadiaбатическое сжатие — неидеальная плазма
1997	ДаСильва, Клауб и др. — лазерные ударные волны — неидеальная плазма
2001	Трунин, Фортов и др. — взрывные сферические ударные волны — неидеальная плазма
2001	Асей, Кнудсон — электродинамическое ударно-волновое сжатие 1 Мбар
2005	Жерноклетов, Мочалов, Фортов и др. — взрывное цилиндрическое сжатие, плазменный фазовый переход

Физически это соответствует сильному перекрытию волновых функций электронов соседних атомов даже в основном энергетическом состоянии. Такое перекрытие создает условия для делокализации [64] электронов и, следовательно, возможности их квазисвободного движения в плазме. Энергетический спектр и эффективный потенциал ионизации водорода  $\Delta E$  в зависимости от размера сферы Вигнера–Зейтца представлен на (рис. 8.30). Сплошными линиями отмечена верхняя граница зоны, рассчитанная из условия равенства нулю радиальной части волновой функции  $R_{nl}(r_c)$  на границе ячейки, а нижняя граница зоны (штриховые линии) определялась из аналогичного условия для ее производной  $R'_{nl}(r) = 0$  (см. подробнее [189]). Видно, что в процессе сжатия, при уменьшении  $r_c$  в условиях эксперимента, происходит уширение энергетических уровней, их трансформация в энергетические зоны с последующим перекрытием этих зон и, как следствие, к уменьшению эффективного потенциала ионизации вещества  $\Delta E$ . Полученная таким образом величина  $\Delta E$  находится в разумном соответствии с соответствующим значением, следующим из экспериментальных измерений температурной зависимости проводимости.

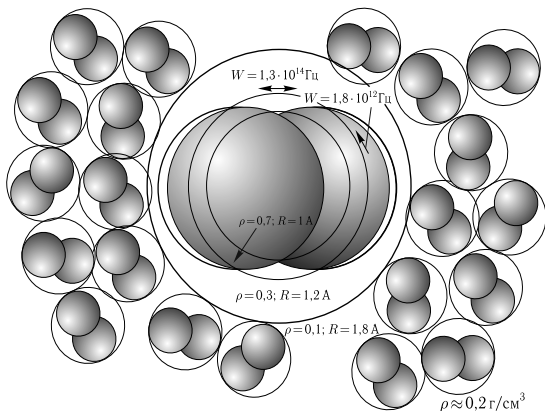


Рис. 8.29. Водород в мегабарном диапазоне давлений [123, 183–186]. Молекула — затемненные кружки, окружности — ячейки Вигнера–Зейтца при плотности  $\rho$

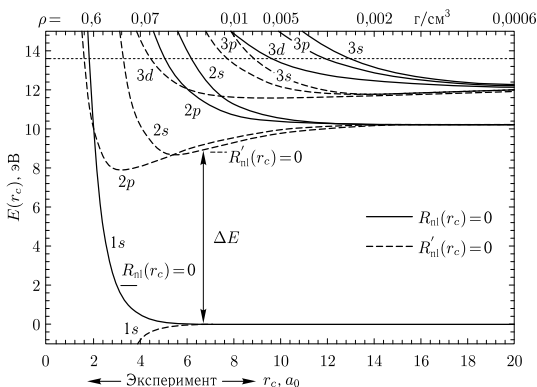


Рис. 8.30. Энергетический спектр сжатого водорода в зависимости от радиуса сферы Вигнера–Зейтца  $r_c$

Аналогичные данные по измерению проводимости квазиadiaбатически сжатой плазмы были получены для ряда других элементов — He (рис. 8.31),  $D_2$ , Ag, Xe и смеси водорода с гелием — плазмы атмосферы Юпитера [189].

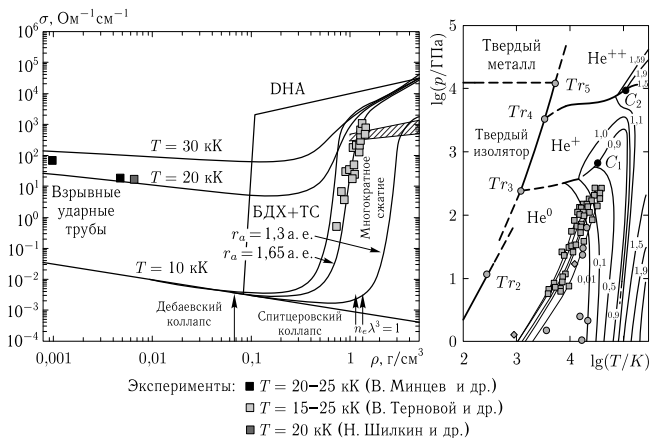


Рис. 8.31. Фазовая диаграмма и ионизация давлением плазмы гелия

Для дополнительного изучения эффекта перекрытия электронных оболочек были выполнены эксперименты [196] по квазиadiaбатическому сжатию фуллерена  $C_{60}$ , имеющего характерный размер молекулы, значительно превосходящий размер атома водорода ( $7\text{ \AA}$  против  $1\text{ \AA}$ ). Как и ожидалось, давление «металлизации» фуллерена  $C_{60}$  оказалось (рис. 8.32) приблизительно на порядок меньшим, чем у водорода.

Отметим, что модели перехода вещества в проводящее состояние Мотта, Андерсона, Лифшица, Герцфельда, Ликальтера (см. подробней [64, 189]) также предсказывают переходы в близком эксперименту диапазоне параметров.

Характерной чертой большинства физических моделей неидеальной плазмы является их термодинамическая неустойчивость в области высоких неидеальностей  $\Gamma > 1$  [101, 190–195, 201–206], там где были запланированы и проведены опыты по динамическому сжатию плазмы [123, 183–186, 207–213]. Эта неустойчивость сильносжатых кулоновских систем соответствует «плазменному» фазовому переходу, предсказанному на упрощенных моделях Вигнером [201], Ландау и Зельдовичем [194], Норманом и Старостиним [101], Эбелингом и др. [64, 195], Сомоном и Шабрие [202, 205] и воспроизведенному беспараметрическими методами молекулярной динамики [206] и квантовым методом Монте–Карло [190, 197]. Соответствующая область плазменной неустойчивости («дебаевский коллапс»), предсказанная кольцевым дебаевским приближением, отмечена на рис. 8.28 левой вертикальной стрелкой. На рисунке 8.33 приведены расчеты структуры неидеальной водородной плазмы методом Монте–Карло, использующего для учета квантовых эффектов технику интегралов по траекториям [190–193]. Хорошо видно фазовое рас-

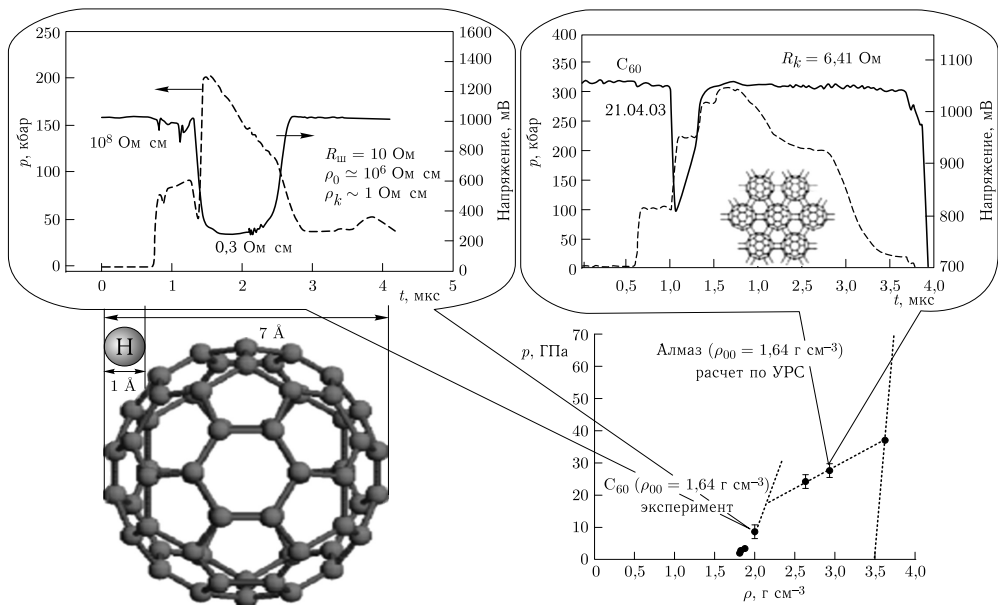


Рис. 8.32. «Металлизация» фуллерена C<sub>60</sub> при высоких динамических давлениях [196]

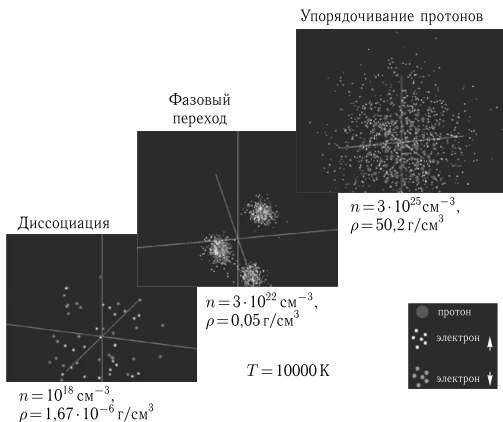


Рис. 8.33. Упорядоченные структуры неидеальной плазмы водорода в области плазменного фазового перехода. Расчет квантовым методом Монте-Карло [182, 191–193, 197]

слоение плазмы с последующим формированием упорядоченной плазменной структуры в неидеальной плазме.

С целью поиска фазового перехода в реальной электрон-ионной плазме были выполнены эксперименты [186] по взрывному квазиизэнтропическому сжатию дейтериевой плазмы в цилиндрической геометрии с измерением плотности плазмы методом импульсной рентгенографии (рис. 8.33, 8.35). Результаты экспериментов показали резкий ( $\approx 25\%$ ) скачок плотности плазмы при давлении  $p \approx 1,2$  Мбар как раз в области плотностей, где электрофизические измерения [123, 183–188] уверенно демонстрируют резкий (5–6 порядков) рост электропроводности (см. рис. 8.28 и данные по проводимости на рис. 8.34) и где расчеты квантовым методом Монте-Карло [190–193] теряют свою устойчивость. Оцененные для этих условий величины параметра неидеальности составляют  $\Gamma \approx 150$ – $200$  при частичном вырождении плазмы,  $n\lambda^3 \approx 1$ .

На рисунке 8.36 показано сравнение непосредственных данных эксперимента [186] с результатами теоретических расчетов [198] в  $p$ – $T$  координатах, где температура разрыва на экспериментальной изоэнтропе рассчитана по первичным экспериментальным ( $p, V$ ) данным с использованием термодинамического кода SANA-H [215].

Представляется, что полученные термодинамические и электрофизические измерения свидетельствуют об экспериментальной фиксации фазового перехода в неидеальной плазме при ее квазиизэнтропическом сжатии [198].

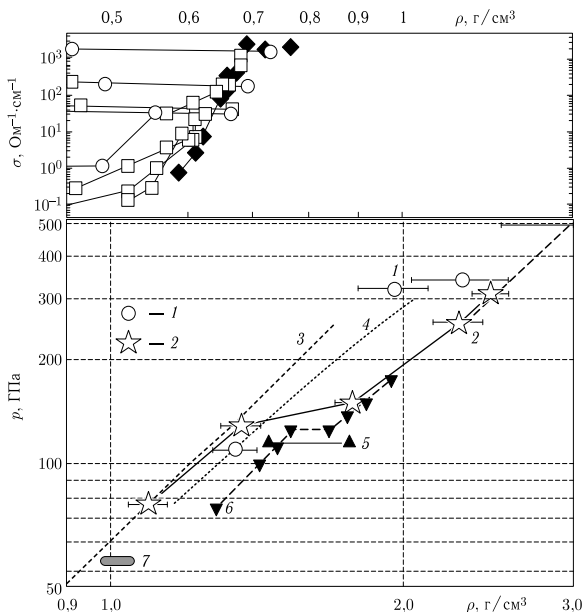


Рис. 8.34. [215]. Изэнтропическое сжатие дейтерия. Сравнение экспериментальных данных и предсказаний теории. Вверху приведены данные по измерению электропроводности (рис. 136 из [108]). Обозначения: 1, 2 — эксперименты: 1 — 1972 [133]; 2 — 2005 [201]; 3–4 — расчеты изэнтропы дейтерия: 3 — химическая модель плазмы (код SAHA-D [201]); 4 — модель «сжимаемого коволюма» [173, 174]; 5–7 — предсказания «плазменного» фазового перехода: 5 — химическая модель плазмы ( $T \div 2000\text{--}10\,000$  K) [161]; 6 — метод «волновых пакетов» [WP/MD] (изотерма  $T = 1500$  K) [171, 172]; 7 — метод функционала плотности [DFT/MD] (аномалии УРС при  $T \approx 3000$  K) [168–170]

## 8.5. Неконгруэнтные фазовые переходы

Указанные выше фазовые превращения предсказаны моделями, развитыми для описания однокомпонентных систем: водорода, гелия или инертных газов. Очень часто переход к термодинамике смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  осуществляется в рамках упрощенного «приближения аддитивности» (напр. [136, 160] и др.). В этом приближении удельный объем и энтальпия смеси заменяются суммой удельных объемов и энтальпий составляющих:

$$V_{\text{H} + \text{He}}(p, T) = (1 - Y)V_{\text{H}}(p, T) + YV_{\text{He}}(p, T) \quad (Y \equiv \text{He}/\text{H} \text{ по весу}). \quad (8.9)$$

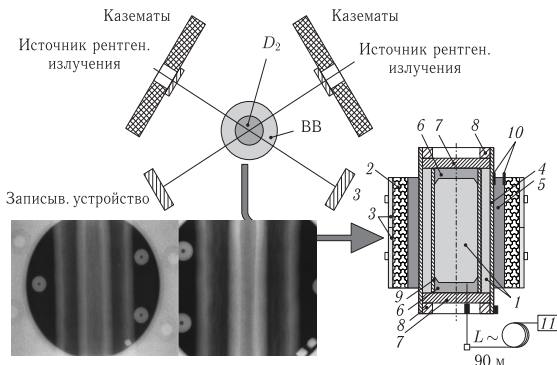


Рис. 8.35. Взрывные цилиндрические устройства для квазиизэнтропического сжатия плазмы [186, 198–200]: 1 — цилиндрический образец, 2 — заряд ВВ, 3, 4 — внешний и внутренний металлический лайнеры, 5 — источник рентгеновского излучения, 6 — рентгеновские регистраторы

У аппроксимации (8.9) есть важная особенность именно с точки зрения трансформации фазовых границ [215]. Структура уравнения (8.9) такова, что  $p$ - $T$  координаты спинодалей, бинодалей и критической точки ФП из чистых веществ без изменений переносятся на смесь, т. е. итоговая фазовая диаграмма смеси в  $p$ - $T$  координатах (а также  $\mu$ - $T$  и  $\mu$ - $p$ ) является прямой суперпозицией фазовых диаграмм составляющих [221]. Это означает, в частности, что все фазовые границы в смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  продолжают оставаться, как в простом веществе, одномерными кривыми  $p_s$ - $T_s$ , заканчивающимися традиционного типа критическими точками,  $(\partial p / \partial V)_T = 0$ ;  $(\partial^2 p / \partial V^2)_T = 0$  [154, 155, 219]. В общем случае именно это является неверным и возможно только как исключение. На рисунке 8.37 в качестве примера приведена даваемая приближением (8.9) гипотетическая фазовая диаграмма смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  как суперпозиция из четырех отдельных ФП: двух водородоподобных — плазменного (по [140]) и диссоциативного (по [166, 167]) фазовых переходов, и двух ПФП в гелии (по одному на каждую степень ионизации) [159].

Следует отметить, что такая картина является преувеличением, так как по крайней мере для «плазменных» ФП известно [136], что в реальности присутствие гелия ослабляет склонность к ПФП у водорода (по ДФП нет таких данных), и напротив, присутствие водорода ослабляет склонность к ПФП у гелия. Но следует подчеркнуть, что даже в случаях модельных расчетов смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  [136] фазовые границы смеси по традиции находят спрямлением «петель Ван-дер-Вальса» по правилу «равных площадей» Максвелла, или же по правилу «двойной касательной», и рисуют для различных пропорций  $\text{He}/\text{H}_2$  как одномерные  $p$ - $T$  кривые перехода обычного типа со стандартной критической точкой (точками) [136].

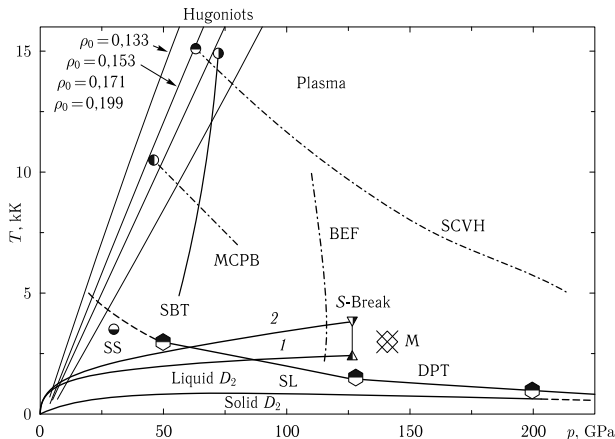


Рис. 8.36. [215]. Изэнтропическое сжатие дейтерия. Сравнение данных эксперимента и теории: 1, 2 — расчет изэнтропы по моделям SAHA (1) [215] и MCK (2) [171, 172]; S-Break — разрыв на изэнтропе (расчет); PPT — гипотетические «плазменные» ФП: SS — [216]; SCVH — [160]; SBT — [136]; MCPB — [138]; BEF — [140]; DPT — «диссоциативный» ФП [166], [167]; сплошная — ФП 1-го рода, пунктир — «размытый» ФП; SL — кривая плавления (расчет [168]); M — металлизация водорода [123]; Hugoniots — ударные адиабаты (расчет, код SAHA [215]) при различной начальной плотности газового ( $\rho_0 = 0,133/0,153 \text{ г/см}^3$ ) жидкого ( $\rho_0 = 0,171 \text{ г/см}^3$ ) и твердого дейтерия ( $\rho_0 = 0,199 \text{ г/см}^3$ ), реализованные в экспериментах ВНИИЭФ (Саров) [217] и Sandia Lab. [218]

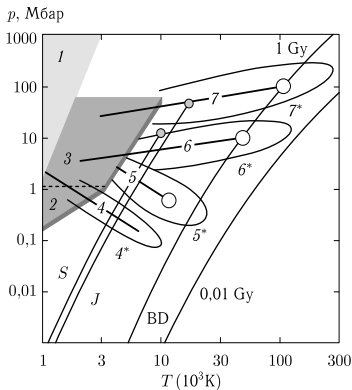
В общем случае свойства фазовых переходов в системах из двух и более химических элементов существенно отличаются от свойств ФП в простых элементах (см. [247]). Главным отличием таких ФП является их неконгруэнтный характер, т. е. расслоение на фазы с различающейся стехиометрией. При этом наличие многих сортов в описании процесса диссоциации и ионизации не имеет значения. Указанные особенности мы подробно рассмотрим чуть ниже на примере неконгруэнтного испарения в высокотемпературной системе уран-кислород, продукте экстремального (аварийного) нагрева диоксида урана ( $\text{UO}_2$ ), топлива ядерных реакторов [221–223]. Рассмотрим наиболее важные в контексте настоящего обсуждения положения.

В работе [221] подчеркнута, что указанные особенности неконгруэнтных ФП помимо испарения в системе уран-кислород присущи, в принципе, любым переходам в смесях химических элементов, и в частности плазменному и диссоциативному ФП в гелий-водородной смеси в недрах планет-гигантов. Выяснение масштаба этого явления и его влияния на эволюцию планет требует проведения полномерных расчетов указанного эффекта по методи-

ке, описанной в работах [221–223]. Целесообразность таких расчетов обусловлена результатом оценки степени неконгруэнтности одного из вариантов плазменного ФП [160] в смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$ , о чем сообщалось в работе [226]. Полученное в [226] отклонение стехиометрии сосуществующих фаз оказалось совпадающим по знаку и сравнимым по величине с наблюдаемой величиной гелиевого обеднения атмосфер Юпитера и Сатурна [156]. Полученный результат оправдывает изучение расчета неконгруэнтности помимо [160] для всех других гипотетических фазовых переходах, предсказанных в водороде и гелии, перенесенных на условия смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  (см. рис. 8.20–8.24, 8.38). Качественный эффект обсуждаемой неконгруэнтности гипотетических фазовых переходов в недрах планет-гигантов показан на рис. 8.37. Главное предсказываемое изменение — расщепление одномерных в приближении (8.9) водородоподобных и гелиеподобных межфазных границ в двумерные зоны  $4^*–7^*$ . Вместе с тем следует подчеркнуть, что помимо неконгруэнтности переход от чистых  $\text{H}_2$  и  $\text{He}$  к их смеси, подавляет масштаб исходных фазовых переходов, т.е. присутствие гелия ослабляет склонность к ПФП у водорода (по ДФП нет таких данных), и напротив, присутствие водорода ослабляет склонность к ПФП у гелия [136]. Это позволяет предположить достаточно сложную структуру финальной фазовой диаграммы смеси в сравнении с простыми схемами, приведенными на рис. 8.37.

Эффект неконгруэнтности в смеси  $\text{H}-\text{He}$  для условий Юпитера и Сатурна в рамках модели плазменного перехода [160] рассмотрен в работе [224]. Опираясь на табличные результаты работы [160], восстановлен ряд термодинамических величин водородно-гелиевой плазмы недр Юпитера и Сатурна, в диапазоне параметров, соответствующих условиям вблизи границ сосуществования ПФП [160]. Используя общие термодинамические соотношения, восстановлены характеристики кулоновских и плотностных поправок (так

Рис. 8.37. Фазовая диаграмма смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  в условиях недр астрофизических объектов: J — Юпитер, S — Сатурн, BD — коричневые калики (1 и 0,01 Млет); 1 — твердый водород, 2, 3 — зоны водород-гелиевой несмеси: 2 — нейтральная жидкость [219]; 3 — плазма [220]; 4, 5, 6, 7 — границы фазовых переходов в смеси в приближении аддитивности (1): 4, 5 — водородоподобные ПФП: диссоциативный по [166, 167, 169, 170] и плазменный по [160]; 6, 7 — гелиеподобные по [159]; 6 — 1-я ионизация, 7 — 2-я ионизация; о — критические точки;  $4^*$ ,  $5^*$ ,  $6^*$ ,  $7^*$  — гипотетическое размывание межфазных границ в зоны из-за неконгруэнтности ФП в смеси  $\text{H}_2 + \text{He}$  [221]



называемые «поправки на неидеальность»). Это дало возможность оценить для этой версии ПФП две неизвестные ранее характеристики:

(А) величину скачка электростатического потенциала межфазной границы «плазменного» фазового перехода, в общем случае присущего любому фазовому переходу в равновесных кулоновских системах [225], и

(Б) характерный масштаб неконгруэнтности ПФП (т.е. различия в стехиометрии сосуществующих фаз) в водород-гелиевой плазме недр Юпитера и Сатурна.

В то время как первая величина — потенциал межфазной границы ПФП, оказался в пределах характерного масштаба контактных электрохимических потенциалов [225], т.е.  $\Delta\varphi \approx 1-2$  эВ (рис. 8.38), вторая восстановленная величина — неконгруэнтность ПФП [160], применительно к условиям Сатурна и Юпитера, оказалась значительной (рис. 8.39) и, что важно, совпадающей по знаку и сравнимой по величине с размером экспериментально наблюдаемого «дефицита» гелия в атмосфере планет-гигантов. Согласно данным обзора [156],  $Y(\text{He})_{\text{Jupiter}} \approx 0,231$ ,  $Y(\text{He})_{\text{Saturn}} \approx 0,215$ . Интересно подчеркнуть, что находящийся в настоящий момент на орбите Сатурна земной аппарат Кассини-Гюйгенс имеет задачу (среди других) проверки и уточнения величины вышеупомянутого «дефицита» гелия в атмосфере Сатурна.

Рассмотрим фазовые превращения при высокотемпературном испарении многокомпонентных смесей на примере диоксида урана — основного топлива современной ядерной энергетики [226] (см. также [221–223, 227, 240]).

Знание уравнения состояния (УРС) продуктов нагрева  $\text{UO}_2$  необходимо для анализа возможных последствий крупной ядерной аварии на существующих и разрабатываемых на перспективу типах ядерных реакторов. Согласно существующим сценариям такой аварии реально достижимыми в ее процессе могут быть температуры в несколько тысяч кельвинов, что соответствует оцениваемым давлениям паров во многие сотни атмосфер. Принципиальной

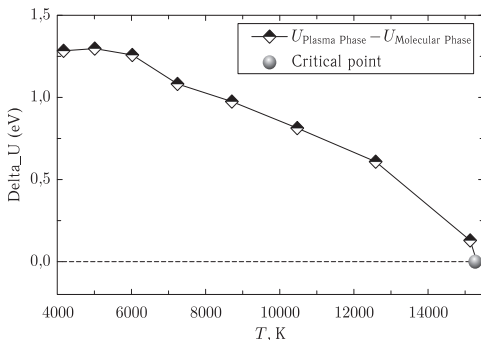


Рис. 8.38. [224]. Потенциал межфазной границы гипотетического «плазменного» фазового перехода (ПФП) в версии [160]

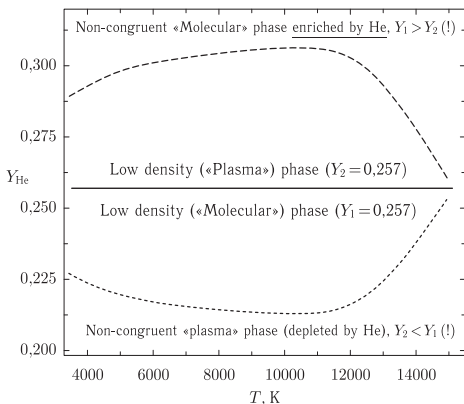


Рис. 8.39. [224]. Неконгруэнтность гипотетического ПФП (в версии [160]) в водород-гелиевой смеси в условиях недр Юпитера и Сатурна ( $Y_{\text{He}} \approx 0,257$ ). Зависимость доли гелия от температуры для сосуществующих «плазменной» и «молекулярной» фаз

особенностью процесса испарения диоксида урана является его неконгруэнтный характер, выражающийся в возможности сосуществования фаз с разной стехиометрией. Следствием этого является возможность резкого кислородного обогащения продуктов испарения диоксида урана, что представляет дополнительную угрозу в ряду гипотетических последствий ядерной аварии.

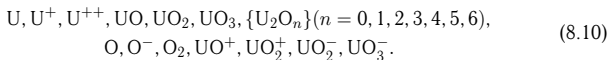
Неконгруэнтный характер испарения является отличительной чертой фазового равновесия в высокотемпературной химически активной неидеальной плазме [221–223]. Неконгруэнтность резко усложняет структуру и свойства высокотемпературной части фазовой диаграммы широкого класса веществ, представляющих собою химические соединения. Проблемы, вытекающие из этого обстоятельства, являются особенно актуальными для теплофизики фазового равновесия во многих объектах ядерной энергетики, таких как диоксид урана,  $\text{UO}_2$  — для действующих реакторов, в особенности для реакторов-размножителей на быстрых нейтронах [222]. Это также важно и для многих разрабатываемых на перспективу ядерных энергоустройств, и, прежде всего для семейства газофазных ядерных реакторов (так называемой схемы «В» [228–232]) в различных вариантах которого в качестве рабочей сред широко представлены смеси урана с различными металлами, водородом и другими веществами [229, 230]. Указанная неконгруэнтность имеет принципиальное значение и для схемы газофазного реактора на гексафториде урана,  $\text{UF}_6$  [231, 232]. Согласно принятой сегодня практике, как эксплуатация и модернизация действующих реакторов, так и разработка реакторов перспективных схем, должны сопровождаться, помимо расчетно-теоретического и экспериментального исследований штатных режимов, еще и обязательным

расчетно-теоретическим (и по возможности экспериментальным) исследованием возможных последствий гипотетических внештатных ситуаций (аварий), включая и их крайние варианты так называемые «запредельные» ядерные аварии [222].

Разработанное в работах [221–227] уравнение состояния предназначено для описания испарения в уран-кислородной смеси как гипо- так и гиперстехиометрического состава. Модель, в отличие от моделей [234–237], впервые корректно учитывает указанную выше неконгруэнтность испарения во всем диапазоне температур, и как следствие этого впервые корректно воспроизводит общую структуру всей фазовой границы, включая районы так называемой ретроградной конденсации, точки экстремального давления и температуры фазовой границы и, наконец, истинную критическую точку неконгруэнтного испарения. Новое уравнение состояния системы уран-кислород описывает известные свойства жидкого диоксида урана вблизи его температуры плавления и используется далее для экстраполяции термодинамического описания свойств  $UO_{2\pm X}$  в области высоких температур, включая параметры перехода газ-жидкость в районе его критической точки.

Обе сосуществующие фазы, жидкая и газо-плазменная, описываются в едином представлении, как многокомпонентная, сильно взаимодействующая («неидеальная») смесь химически реагирующих атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов.

В непосредственных расчетах термодинамически равновесной системы уран-кислород использовался следующий набор компонентов:



Принципиальным моментом развитого подхода было то, что использование этих же идеально-газовых индивидуальных термодинамических функции компонентов системы уран-кислород экстраполировалось и для расчета химического и ионизационного равновесия в сильно-неидеальной системе уран-кислород, соответствующей жидкому диоксиду урана. В реальных расчетах фазового равновесия указанные выше идеально-газовые характеристики дополнялись целым комплексом так называемых «поправок на неидеальность», самосогласованно учитывающих эффекты всего спектра интенсивных межчастичных взаимодействий в системе [229]. Многочисленные и практически неизвестные заранее параметры межчастичного взаимодействия всех заряженных и нейтральных компонент системы предварительно оценивались теоретически и затем окончательно корректировались («калибровались») с целью воспроизвести набор известных термодинамических свойств жидкого диоксида урана (плотность, давление паров и др.) в точке плавления ( $T = 3120$  K).

Наиболее интересным результатом подхода [221–227], является необычная структура предсказываемой фазовой границы процесса испарения диоксида урана (рис. 8.40). Результаты расчета демонстрируют принципиальное отличие этой структуры от известных аналогов высокотемпературной фазовой границы в «простых» веществах, например в металлах (см. п. 8.3). Это отличие является прямым следствием указанного выше неконгруэнтного

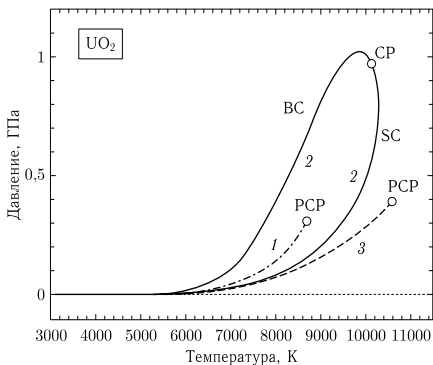


Рис. 8.40. Фазовая  $p$ - $T$  диаграмма испарения диоксида урана ( $\text{UO}_{2,0}$ ). 1 — кривая принудительно-конгруэнтного равновесия, построенная по стандартному правилу «двойной касательной» ( $BC = SC$ ), с псевдо-критической точкой (PCP); 2 — истинная граница двухфазной области полностью равновесного неконгруэнтного испарения с кривой кипения (BC), насыщения (SC) и истинной критической точкой (CP) по результатам настоящей работы; 3 — полное давление пара на кривой кипения и псевдо-критическая точка (PCP) по данным [235–237] (расчет по теории «значимых структур»)

характера испарения в неидеальной химически реагирующей плазме, и в частности, в плазме диоксида урана. Главной отличительной особенностью этого испарения является резкая зависимость его параметров, как давления паров, так и степени их кислородного обогащения, от скорости испарения [238]. На языке термодинамики это эквивалентно расщеплению единой прежде зависимости давления насыщенных паров от температуры,  $p_{\text{sat}}(T)$ , на две различающихся границы: — кривой кипения (boiling curve — BC) и кривой насыщения (saturation curve — SC) (рис. 8.40).

Первая граница (BC) соответствует равновесию (химическому, ионизационному и фазовому) жидкого диоксида урана стехиометрического состава,  $\text{UO}_{2,0}$ , с нестехиометрической (обогащенной кислородом) паровой фазой,  $\text{UO}_{2+X}$  ( $X \geq 0$ ). Динамически это соответствует режиму медленного, полностью термодинамически равновесного испарения  $\text{UO}_{2,0}$ , наиболее близкому к режиму, который действительно должен реализоваться в процессе гипотетической аварии на ядерном реакторе. Вторая граница (SC), напротив, соответствует равновесию паровой фазы стехиометрического состава,  $\text{UO}_{2,0}$ , с нестехиометрическим (кислородно-обедненным) жидким  $\text{UO}_{2+X}$  ( $X \leq 0$ ). Динамически это соответствует режиму сверхбыстрого принудительно-конгруэнтного режима лишь частично равновесного испарения, при котором стехиометрия испаряемого материала не успевает измениться («Forced Congruent Mode» — FCM) [238]. Непосредственным следствием неконгруэнтного характера испарения в диоксиде урана является примечательно высокий уровень

максимального давления паров, теоретически предсказываемого на кривой кипения ( $p_{\max} \approx 1$  ГПа) (рис. 8.40).

Другим важным следствием, предсказываемым настоящей теорией, является чрезвычайно высокая степень максимального кислородного обогащения паровой фазы, находящейся в равновесии с кипящим диоксидом урана стехиометрического состава,  $\text{UO}_{2.0}$  {max (O/U)<sub>BC</sub>  $\approx 7$  при  $T \approx 8000$  K} (рис. 8.41).

Еще одним важным следствием, предсказываемым настоящей теорией, является необычная форма фазовой диаграммы неконгруэнтного испарения в координатах энтальпия-температура, опять-таки, существенно отличной от аналогичной  $H$ - $T$  диаграммы испарения «обычных веществ» (рис. 8.42). Наиболее яркой особенностью здесь является немонотонная зависимость от температуры для аналога теплоты испарения,  $Q_{\text{vap}} \equiv H(T)_{\text{vap}} - H(T)_{\text{liquid}}$ . Все перечисленные выше особенности являются крайне важными для приложений, связанных с проблемой ядерной безопасности.

Достоинством теоретического подхода, используемого в работах [221–223], является возможность единого и самосогласованного описания УРС сильно взаимодействующей системы уран-кислород в окрестности истинной критической точки неконгруэнтного фазового перехода. Свойства этой критической точки, как и весь фазовый переход в целом, принципиально отличаются от свойств критической точки «обычного» фазового перехода газ-жидкость, которой соответствует выполнение стандартных

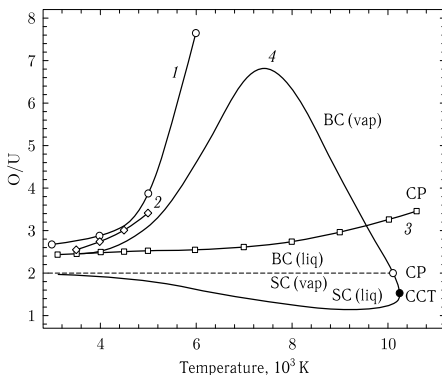


Рис. 8.41. [222]. Отношение O/U в сосуществующих фазах в процессе неконгруэнтного испарения диоксида урана ( $\text{UO}_{2.0}$ )  $I$  — стехиометрия газовой фазы по модели [239];  $2$  — то же по результатам расчета равновесного состава в работе [234];  $3$  — то же согласно расчетам по теории «значимых структур» (SST) [235–237];  $4$  — граница двухфазной области неконгруэнтного испарения, вычисленная в работах [219–223, 226, 227]. Отмечены: стехиометрия сосуществующих пара и жидкости в режиме кипения (BC) и насыщения (SC), а также истинная критическая точка (CP) и точка максимума температуры на кривой насыщения (CCT)

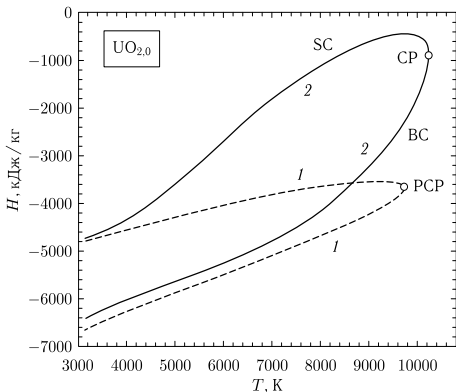


Рис. 8.42. Фазовая диаграмма энтропия–температура для неконгруэнтного испарения диоксида урана ( $\text{UO}_{2.0}$ ) 1 — граница двухфазной области диоксида урана, описываемого в представлении мономолекулярной системы взаимодействующих молекул  $\text{UO}_2$  (стандартный тип фазовой диаграммы с псевдо-критической точкой (PCP)); 2 — истинная граница двухфазной области неконгруэнтного испарения с кривой кипения (BC), кривой насыщения (SC) и истинной критической точкой (CP) по результатам работ [221–223, 226]

отношений:  $[(\partial p/\partial V)_T = (\partial^2 p/\partial V^2)_T = 0; (\partial^3 p/\partial V^3)_T < 0]$ . В частности, изотермическая сжимаемость системы в критической точке неконгруэнтного фазового перехода не стремится к бесконечности, а оказывается близкой к идеально-газовому значению,  $(\partial \ln p/\partial \ln V)_T \approx 1 \neq 0$ . Определяющим же признаком критической точки неконгруэнтного фазового перехода является потеря положительной определенности матрицей  $\|\partial \mu_i/\partial n_j\|$  ( $\mu_i$  и  $n_i$  — хим. потенциал и концентрация  $i$ -го сорта частиц).

Настоящая модель предсказывает следующие параметры этой критической точки:

$$\begin{aligned}
 T_{\text{кр}} &\approx 10120 \text{ K}, & p_{\text{кр}} &\approx 965 \text{ МПа}, & \rho_{\text{кр}} &\approx 2,61 \text{ г/см}^3, \\
 S_{\text{кр}} &\approx 1,64 \text{ кДж/кг} \cdot \text{К}, & \Gamma_{\text{D}} &\equiv e^2/kTR_{\text{D}} \approx 1,2, \\
 C_p &\approx 1,8 \text{ кДж/кг} \cdot \text{К}, & \beta_T &\equiv \rho^{-1}(\partial \rho/\partial p)_T \approx 1,03 \cdot 10^{-4} \text{ 1/бар}, \\
 \alpha_p &\equiv \rho^{-1}(\partial \rho/\partial p)_T \approx 5,15 \cdot 10^{-4} \text{ 1/К}.
 \end{aligned} \tag{8.11}$$

В последние годы методом импульсного нагрева были получены интересные результаты по измерению давления паров неконгруэнтно испаряющегося диоксида урана [245]. Детали экспериментальной техники и специальных приемов, использованных для проведения корректных измерений и получения значимых экспериментальных результатов, подробно обсуждаются в [241]. Теоретический анализ [224], привел к выводу о том, что в свете существен-

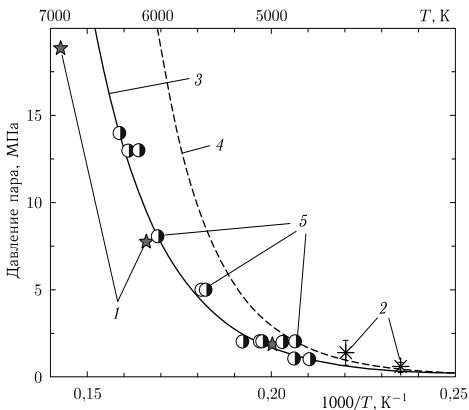


Рис. 8.43. [221]. Фазовая диаграмма давление–температура неконгруэнтного испарения диоксида урана ( $\text{UO}_{2,0}$ ). Сравнение теоретических расчетов с результатами измерений: 1 — граница кипения в «ампульном» эксперименте [243–245]; 2 — граница кипения в эксперименте с лазерным нагревом [246]; 3 — расчетная граница неконгруэнтного кипения жидкой фазы  $\text{UO}_{2,0}$  по результатам [221–223]; 4 — расчетная граница неконгруэнтного насыщения газовой фазы с  $\text{O}/\text{U} = 2,0$  по результатам [221–223]; 5 — граница насыщения газовой фазы в эксперименте ИВТАН с лазерным нагревом [241, 242]

ной неконгруэнтности испарение диоксида урана, давление пара, измеренное в эксперименте [245], соответствует условиям не полностью равновесного (квазистационарного) режима кипения, а напротив, режиму быстрого «форсированно конгруэнтного» испарения, что на языке термодинамических режимов неконгруэнтного испарения соответствует режиму насыщения, т. е. равновесию кислородно-обедненной жидкости с паром диоксида урана строго стехиометрического состава ( $\text{O}/\text{U} = 2,00$ ) (см. рис. 8.41). Сравнение результатов эксперимента [241] с результатами расчета по описанной выше теоретической модели [222] подтверждает этот вывод и служит дополнительным доводом в пользу адекватности построенного теоретического уравнения состояния высокотемпературной системы уран-кислород (диоксида урана). Это сравнение приведено на рис. 8.43.

### Список литературы

1. Ландау Л. Д. // ЖЭТФ. — 1937. — Т. 7. — С. 627.
2. Стишов С. М. Плавление при высоких давлениях // УФН. — 1968. — Т. 96, № 11. — С. 467.
3. Стишов С. М. Термодинамика плавления простых веществ // УФН. — 1974. — Т. 114, № 9. — С. 3.

4. Корнер С. Б. Оптические исследования свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков // УФН. — 1968. — Т. 94, № 4. — С. 641.
5. Макаренко И. Н., Николаенко А. М., Стишов С. М. // ЖЭТФ. — 1978. — Т. 74. — С. 2175.
6. *Mirwald P. W.* // High Pressure Science and Technology / Ed. by K. D. Timmerhaus, M. S. Barber. — N.Y.: Plenum Press, 1979. — V. 1. — P. 361.
7. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. — М.: Мир, 1958.
8. Ващенко В. Г., Зубарев В. Н. // ФТТ. — 1963. — Т. 5. — С. 886.
9. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
10. *Urtiew P. A., Grover R.* // J. Appl. Phys. — 1977. — V. 48. — P. 1122.
11. *Ross M.* Generalized Lindemann Melting Law // Phys. Rev. — 1969. — V. 184, No. 1. — P. 233.
12. *Ree F. H.* Physical Chemistry — An Advanced Treatise: Liquid State / Ed. by H. Eyring, D. Henderson, W. Yost. — N.Y.: Academic Press, 1971. — V. 8A.
13. *Palciauskas V.* Lindemann's criterion and the melting of solids at high pressures // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1976. — V. 37, No. 6. — P. 571.
14. *Palciauskas V.* Lindemann's criterion and the necessary condition for a melting curve maximum // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1979. — V. 40, No. 10. — P. 787.
15. Бозулавский Ю. А., Воронов Ф. Ф., Ильина М. А., Стальгорова О. В. // ЖЭТФ. — 1979. — Т. 77. — С. 946.
16. *Zha C.-S., Boehler R.* Melting of sodium and potassium in a diamond anvil cell // Phys. Rev. B. — 1985. — V. 31. — P. 3199.
17. Melting of Dense Sodium / *Gregoryanz E., Degtyareva O., Somayazulu M. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2005. — V. 94. — P. 185502.
18. Raman Spectroscopy of Hot Dense Hydrogen / *Gregoryanz E., Goncharov A. F., Matsuishi K. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2003. — V. 90. — P. 175701.
19. *Datchi F., Loubeyre P., LeToullec R.* Extended and accurate determination of the melting curves of argon, helium, ice (H<sub>2</sub>O), and hydrogen (H<sub>2</sub>) // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 61. — P. 6535.
20. Молодец А. М., Фортвов В. Е. Фазовые переходы диоксида урана при высоких давлениях и температурах // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 3. — С. 196.
21. Электрофизические свойства кальция при высоких давлениях и температурах / *Фортвов В. Е., Молодец А. М., Постнов В. И. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 79, № 7. — С. 425.
22. *Jayaraman A., Klement W., Kennedy G. C.* Phase Diagrams of Calcium and Strontium at High Pressures // Phys. Rev. — 1963. — V. 132. — P. 1620.
23. Phase behavior of krypton and xenon to 50 GPa / *Errandonea D., Schwager B., Boehler R., Ross M.* // Phys. Rev. B. — 2002. — V. 65. — P. 214110.
24. *Olijnyk H., Holzapfel W.* Phase transitions in alkaline earth metals under pressure // Physics Letters A. — 1984. — V. 100, No. 4. — P. 191.
25. *Winzenick N., Holzapfel W. B.* High Pressure Science and Technology / Ed. by W. Trzeciakowski. — Singapore: World Scientific, 1996.
26. *Molodets A. M., Molodets M. A., Nabatov S. S.* Free energy and shock compression of diamond // AIP Conference Proceedings. — 1998. — V. 429, No. 1. — P. 91.
27. Equation of state and phase diagram of carbon / *Averin A. B., Dremov V. V., Samarin S. I., Sapozhnikov A. T.* // AIP Conference Proceedings. — 1996. — V. 370, No. 1. — P. 65.

28. *Bundy F. P.* Pressure-temperature phase diagram of elemental carbon // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 1989. — V. 156, No. 1. — P. 169.
29. *Togaya M.* Thermophysical Properties of Carbon at High Pressure // presented at the 3rd NIRIM ISAM'96, Tsukuba, Japan. — 1996. — March.
30. *Knudson M. D., Desjarlais M. P., Dolan D. H.* Shock-Wave Exploration of the High-Pressure Phases of Carbon // *Science*. — 2008. — V. 322, No. 5909. — P. 1822.
31. *Correa A. A., Bonev S. A., Galli G.* Carbon under extreme conditions: Phase boundaries and electronic properties from first-principles theory // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. — 2006. — V. 103, No. 5. — P. 1204.
32. *Grumbach M. P., Martin R. M.* Phase diagram of carbon at high pressures and temperatures // *Phys. Rev. B*. — 1996. — V. 54. — P. 15730.
33. *Wang X., Scandolo S., Car R.* Carbon Phase Diagram from *Ab Initio* Molecular Dynamics // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — V. 95. — P. 185701.
34. *Hubbard W. B., Podolak M., Stevenson D. J.* The Interior of Neptune // *Neptune and Triton* / Ed. by D. P. Cruikshank. — Tucson, AZ: Univ. of Arizona Press, 1995. — P. 109.
35. Diatomic melting curves to very high pressure / *Young D. A., Zha C.-S., Boehler R. et al.* // *Phys. Rev. B*. — 1987. — V. 35. — P. 5353.
36. Spinodal Decomposition in a Model Colloid-Polymer Mixture in Microgravity / *Bailey A. E., Poon W. C. K., Christianson R. J. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — V. 99. — P. 205701.
37. Triple Point on the Melting Curve and Polymorphism of Nitrogen at High Pressure / *Goncharov A. F., Crowhurst J. C., Struzhkin V. V., Hemley R. J.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — V. 101. — P. 095502.
38. Single-bonded cubic form of nitrogen / *Eremets M. I., Gavriluk A. G., Trojan I. A. et al.* // *Nature Mater.* — 2004. — V. 3. — P. 558.
39. Optical Evidence for a Nonmolecular Phase of Nitrogen above 150 GPa / *Goncharov A. F., Gregoryanz E., Mao H. K. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 85. — P. 1262.
40. High-pressure amorphous nitrogen / *Gregoryanz E., Goncharov A. F., Hemley R. J., Mao H. K.* // *Phys. Rev. B*. — 2001. — V. 64. — P. 052103.
41. Transformation of molecular nitrogen to nonmolecular phases at megabar pressures by direct laser heating / *Lipp M. J., Klepeis J. P., Baer B. J. et al.* // *Phys. Rev. B*. — 2007. — V. 76. — P. 014113.
42. *Boates B., Bonev S. A.* First-Order Liquid-Liquid Phase Transition in Compressed Nitrogen // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — V. 102. — P. 015701.
43. *Eremets M. I., Trojan I. A.* Evidence of maximum in the melting curve of hydrogen at megabar pressures // *Письма в ЖЭТФ*. — 2009. — V. 89, № 4. — P. 198.
44. A quantum fluid of metallic hydrogen suggested by first-principles calculations / *Bonev S. A., Schwegler E., Ogitsu T., Galli G.* // *Nature*. — 2004. — V. 431. — P. 669.
45. *Rapoport E.* Model for Melting-Curve Maxima at High Pressure // *J. Chem. Phys.* — 1967. — V. 46, No. 8. — P. 2891.
46. *Rapoport E.* Melting-Curve Maxima at High Pressure. II. Liquid Cesium. Resistivity, Hall Effect, and Composition of Molten Tellurium // *J. Chem. Phys.* — 1968. — V. 48, No. 4. — P. 1433.
47. Hugoniot equation of state of the lanthanides / *Carter W., Fritz J., Marsh S., McQueen R.* // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 1975. — V. 36, No. 7-8. — P. 741.

48. *Алтишулер Л. В., Баканова А. А., Дудолодов И. П.* // ЖЭТФ. — 1967. — Т. 53. — С. 1967.
49. *Gust W. H., Royce E. B.* New Electronic Interactions in Rare-Earth Metals at High Pressure // *Phys. Rev. B.* — 1973. — V. 8, No. 8. — P. 3595.
50. *Алтишулер Л. В., Баканова А. А.* Электронная структура и сжимаемость металлов при высоких давлениях // УФН. — 1968. — Т. 96, № 2. — С. 193.
51. *Grover R., Alder B.* Absence of first order electronic transitions in liquid metals // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* — 1974. — V. 35, No. 6. — P. 753.
52. *McMahan A. K., Skriver H. L., Johansson B.* The *s-d* transition in compressed lanthanum // *Phys. Rev. B.* — 1981. — V. 23, No. 10. — P. 5016.
53. *Glötzel D.* // *J. Phys. Ser. F.* — 1978. — V. 8. — P. L163.
54. *Мао Н. К., Hazen R. M., Bell P. M., Willig J.* // *J. Appl. Phys.* — 1981. — V. 52. — P. 4572.
55. *Киржици Д.* Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489.
56. *Физика простых жидкостей / Под ред. Г. Темперли, Д. Роулинсона, Д. Рашбука.* — М.: Мир, 1971.
57. *Utsumi K., Ichimaru S.* Dielectric formulation of strongly coupled electron liquids at metallic densities. IV. Static properties in the low-density domain and the Wigner crystallization // *Phys. Rev. B.* — 1981. — V. 24, No. 6. — P. 3220.
58. *Тонков Е. Ю.* Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. — М.: Наука, 1979.
59. *McQueen R., Marsh S. P., Taylor J. W. et al.* // *High Velocity Impact Phenomena / Ed. by R. Kinslow.* — N.Y.: Academic Press, 1970. — P. 293.
60. *Алтишулер Л. В., Баканова А. А., Дудолодов И. П. и др.* // ПМТФ. — 1981. — № 2. — С. 3.
61. *Максимов Е. Г., Магницкая М. В., Фортвов В. Е.* Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях // УФН. — 2005. — Т. 175, № 8. — С. 793.
62. *Lithium at high dynamic pressure / Fortov V. E., Yakushev V. V., Kagan K. L. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2002. — V. 14, No. 44. — P. 10809.
63. *Neaton J. B., Ashcroft N. W.* Pairing in Dense Lithium // *Nature.* — 1999. — V. 400. — P. 141.
64. *Гантмахер В. Ф.* Электроны в разупорядоченных средах (курс лекций). — М.: Наука, 2005.
65. Аномальная электропроводность лития при квазиизэнтропическом сжатии до 60 ГПа (0,6 Мбар). Переход в молекулярную фазу? / *Фортвов В. Е., Якушев В. В., Кэган К. Л. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1999. — Т. 70, № 9. — С. 620.
66. *Young D. A., Alder B. J.* Studies in molecular dynamics. XVII. Phase diagrams for «step» potentials in two and three dimensions // *J. Chem. Phys.* — 1979. — V. 70, No. 1. — P. 473.
67. *Young D. A., Alder B. J.* Studies in molecular dynamics. XVIII. The square-well phase diagram // *J. Chem. Phys.* — 1979. — V. 73, No. 5. — P. 2430.
68. *Pettifor D. G.* // *J. Phys. Ser. C.* — 1970. — V. 3. — P. 367.
69. *Moriarty J. A., McMahan A. K.* High-Pressure Structural Phase Transitions in Na, Mg, and Al // *Phys. Rev. Lett.* — 1982. — V. 48. — P. 809.
70. *Duthie J. C., Pettifor D. G.* Correlation between *d*-Band Occupancy and Crystal Structure in the Rare Earths // *Phys. Rev. Lett.* — 1977. — V. 38, No. 10. — P. 564.

71. Structural Phase Transitions in Yttrium under Pressure / *Vohra Y. K., Olijnik H., Grosshans W., Holzapfel W. B.* // Phys. Rev. Lett. — 1981. — V. 47, No. 15. — P. 1065.
72. *Vohra Y. K., Grosshans W., Holzapfel W. B.* High-pressure phase transformation in scandium // Phys. Rev. B. — 1982. — V. 25, No. 9. — P. 6019.
73. Mean valence of Yb metal in the pressure range 0 to 340 kbar / *Syassen K., Wortmann G., Feldhaus J. et al.* // Phys. Rev. B. — 1982. — V. 26, No. 8. — P. 4745.
74. *Хомский Д. И.* Проблема промежуточной валентности // УФН. — 1979. — Т. 129, № 11. — С. 443.
75. *Grosshans W. A., Vohra Y. K., Holzapfel W. B.* Evidence for a Soft Phonon Mode and a New Structure in Rare-Earth Metals under Pressure // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 49, No. 21. — P. 1572.
76. *Johansson B.* Energy difference between trivalent and tetravalent metallic cerium and other f-elements: Stability study of various lanthanide- and actinide-halides and -oxides // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1978. — V. 39, No. 5. — P. 467.
77. *Stager R. A., Drickamer H. G.* Effect of Pressure and Temperature on the Electrical Resistance of Eleven Rare-Earth Metals // Phys. Rev. — 1964. — V. 133, No. 3A. — P. A830.
78. *Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г.* Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // УФН. — 1970. — Т. 100, № 2. — С. 193.
79. *Альтшулер Л. В., Воропинов А. И., Гандельман Г. М. и др.* // ФММ. — 1981. — Т. 51. — С. 76.
80. *Skriver H. L., Jan J. P.* Electronic states in thorium under pressure // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1489.
81. *Jan J. P., Skriver H. L.* // J. Phys. Ser. F. — 1981. — V. 11. — P. 805.
82. *Perrot F.* // Phys. Stat. Sol. Ser. B. — 1980. — V. 101. — P. 741.
83. *Glötzel D., McMahan A. K.* Relativistic effects, phonons, and the isostructural transition in cesium // Phys. Rev. B. — 1979. — V. 20, No. 8. — P. 3210.
84. *Poulsen U. K., Kollar J., Andersen O. K.* // J. Phys. Ser. F. — 1976. — V. 6. — P. L241.
85. *Skriver H. L., Andersen O. K., Johansson B.* Calculated Bulk Properties of the Actinide Metals // Phys. Rev. Lett. — 1978. — V. 41, No. 1. — P. 42.
86. *Skriver H. L., Andersen O. K., Johansson B.* 5f-electron Delocalization in Americium // Phys. Rev. Lett. — 1980. — V. 44, No. 18. — P. 1230.
87. *Лифшиц И. М.* // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 38. — С. 1569.
88. *Glötzel D. T.* Physics of Solids under High Pressure / Ed. by J. Schilling, R. Shelton. — Amsterdam: North Holland, 1981. — P. 263.
89. *Roof R. B., Haire R. G., Schifert D. et al.* // Science. — 1981. — V. 207. — P. 1353.
90. *Vohra Y. K., Holzapfel W. B.* // Phys. Lett. Ser. A. — 1982. — V. 89. — P. 149.
91. *Киржниц Д. А., Шпатаковская Г. В.* // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 62. — С. 2082.
92. *Фортов В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А.* // ТВТ. — 1975. — Т. 13. — С. 1072.
93. *Ohse R. W., Tippelskirch H.* // High Temp.—High Press. — 1977. — V. 9. — P. 376.
94. *Альтшулер Л. В., Бушман А. В., Жерноклетов М. В. и др.* // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 78. — С. 741.

95. *Gathers G. R., Shaner J. W., Young D. A.* Experimental, Very High-Temperature, Liquid-Uranium Equation of State // *Phys. Rev. Lett.* — 1974. — V. 33, No. 2. — P. 70.
96. *Young D. A.* Report UCRL-52352. — Livermore: Univ. of California, 1977.
97. *Gathers G. R., Shaner J. W., Hixson R. S., Young D. A.* // *High Temp. High Press.* — 1979. — V. 11. — P. 653.
98. *Фортвов В.* Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества. — М.: Букоос, 2005.
99. *Fortov V., Yakubov I., Khrapak A.* Physics of Strongly Coupled Plasma. — Oxford: Clarendon Press, 2006.
100. *Фортвов В., Храпак А., Якубов И.* Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
101. *Норман Г. Э., Старостин А. Н.* Термодинамика сильно неидеальной плазмы // *ТВТ.* — 1970. — Т. 8, № 2. — С. 413.
102. *Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д.* Теория связанных состояний и поляризационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир, 1979.
103. *Gitterman M., Steinberg V.* First-Order Phase Transition in Metallic Vapors // *Phys. Rev. Lett.* — 1975. — V. 35, No. 23. — P. 1588.
104. *Wigner E. P.* // *Trans. Farad. Soc.* — 1938. — V. 34. — P. 678.
105. *Cook M. A., Keyes R. T., Udy L. L.* Propagation Characteristics of Detonation-Generated Plasmas // *J. Appl. Phys.* — 1959. — V. 30, No. 12. — P. 1881.
106. *Ландау Л. Д., Зельдович Я. Б.* // *ЖЭТФ.* — 1944. — Т. 14. — С. 32.
107. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
108. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // *УФН.* — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
109. Complex (Dusty) Plasmas: Current Status, Open Issues, Perspectives / *Fortov V. E., Ivlev A. V., Khrapak S. A. et al.* // *Phys. Report.* — 2005. — V. 421. — P. 1.
110. *Jin W., Reno J. et al.* Strongly Coupled Plasma Physics / Ed. by H. Van Horn, S. Ichimaru. — University Rochester Press, 1993. — P. 357.
111. *Dubin D. H. E., O'Neil T. M.* Trapped nonneutral plasmas, liquids, and crystals (the thermal equilibrium states) // *Rev. Mod. Phys.* — 1999. — V. 71. — P. 87.
112. *Schramm U., Schatz T. et al.* Crystalline Ion Beams // *Nature.* — 2001. — V. 412. — P. 717.
113. *Шашкин А.* Переходы металл — диэлектрик и эффекты электрон-электронного взаимодействия в двумерных электронных системах // *УФН.* — 2005. — Т. 175, № 2. — С. 139.
114. *Теплофизические свойства горячей плотной плазмы / Эбелинг В., Ферстер А., Фортвов В. и др.* — Москва, Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2007.
115. *Иосилевский И. Л., Старостин А. Н.* Проблема термодинамической устойчивости в низкотемпературной плазме // *Энциклопедия низкотемпературной плазмы.* — Т. III-1 / Под ред. В. Е. Фортвова. — М.: Наука, 2000. — С. 327.
116. *Норман Г. Э., Старостин А. Н.* // *ТВТ.* — 1968. — Т. 6. — С. 410.
117. *Ichimaru S., Iyetomi H., Ogata S.* // *Astrophys. J.* — 1988. — P. L17.
118. Strongly Coupled Plasma Physics / Ed. by S. Ichimaru. — Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1990.
119. *Haronska P., Kremp D., Schlanges M., Wise Z. W.-P.* // *Univ. Rostock, N-Reihe.* — 1987. — V. 36. — P. 98.

120. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: Pressure dissociation // *Phys. Rev. A.* — 1991. — V. 44, No. 8. — P. 5122.
121. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization // *Phys. Rev. A.* — 1992. — V. 46, No. 4. — P. 2084.
122. *Ebeling W., Richert W.* Plasma phase transition in hydrogen // *Phys. Lett. A.* — 1985. — V. 108. — P. 80.
123. *Weir S. T., Mitchell A. C., Nellis W. J.* Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 76, No. 11. — P. 1860.
124. Ударное сжатие и яркостная температура фронта ударной волны в аргоне. Электронная экранировка излучения / *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1978. — Т. 75. — С. 1683.
125. *Robnik M., Kundt W.* Hydrogen at high-pressures and temperatures // *Astron. Astrophys.* — 1983. — V. 120, No. 2. — P. 227.
126. *Kerley G. I.* // *Phys. Earth Planet Inter.* — 1972. — V. 6. — P. 78.
127. *Franck S.* // *Ann. Physik (Leipzig).* — 1980. — V. 492. — P. 349.
128. *Ebeling W., Sandig R.* // *Ann. Physik (Leipzig).* — 1973. — V. 483. — P. 289.
129. *Marley M. S., Hubbard W. B.* Thermodynamics of dense molecular-hydrogen helium mixtures at high-pressure // *Icarus.* — 1988. — V. 73, No. 3. — P. 536.
130. Thermodynamic properties and plasma phase transition of xenon at high pressure and high temperature / *Ebeling W., Förster A., Richert W., Hess H.* // *Physica A.* — 1988. — V. 150. — P. 159.
131. *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* — 1972. — Т. 16. — С. 286.
132. *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1975. — Т. 66. — С. 743.
133. *Mon K. K., Chester G. V., Ashcroft N. W.* Simulation studies of a model of high-density metallic hydrogen // *Phys. Rev. B.* — 1980. — V. 21, No. 6. — P. 2641.
134. *Mao H. K., Hemley R. J.* Optical studies of hydrogen above 200-gigapascals: evidence for metallization by band overlap // *Science.* — 1989. — V. 244, No. 4911. — P. 1462.
135. Reflected Shock Experiments on the Equation-of-State Properties of Liquid Deuterium at 100–600 GPa (1–6 Mbar) / *Mostovych A. N., Chan Y., Lehecha T. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 85, No. 18. — P. 3870.
136. *Schlanges M., Bonitz M., Tschetschjan A.* Plasma phase-transition in fluid hydrogen-helium mixtures // *Contrib. Plasma Phys.* — 1995. — V. 35. — P. 109.
137. *Reinholz H., Redmer R., Nagel S.* Thermodynamic and transport properties of dense hydrogen plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1995. — V. 52. — P. 5368.
138. Molecular Dissociation in Hot, Dense Hydrogen / *Magro W. R., Ceperley D. M., Pierleoni C., Bernu B.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 76. — P. 1240.
139. *Kitamura H., Ichimaru S.* Metal-Insulator Transitions in Dense Hydrogen: Equations of State, Phase Diagrams and Interpretation of Shock-Compression Experiments // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1998. — V. 67. — P. 950.
140. Equation of state for hydrogen below 10000 K: From the fluid to the plasma / *Beule D., Ebeling W., Förster A. et al.* // *Phys. Rev. B.* — 1999. — V. 59, No. 22. — P. 14177.
141. *Иосилевский И. Л., Грязнов В. К., Фортвов В. Е.* Термодинамика плотного водорода в рамках химической модели // *Физика экстремального состояния вещества* / Под ред. В. Фортова. — Черноголовка: ИХПФ, 2001. — С. 114.

142. Förster A., Kahlbaum T., Ebeling W. Thermodynamic properties and the plasma phase transition of dense helium plasma // High Pressure Research. — 1991. — V. 7, No. 1-6. — P. 375.
143. Förster A., Kahlbaum T., Rickert A. Mean ionization state and composition of a dense high-Z plasma // Zeitschrift für Physik D-atoms molecules and clusters. — 1991. — V. 21, No. . — P. S171.
144. Kahlbaum T., Förster A. Thermodynamic properties of nonideal plasmas with multiple ionization and coulomb and hard-core interactions // Laser Part. Beams. — 1990. — V. 8, No. 4. — P. 753.
145. Seldam C. A. // Proc. Phys. Soc. A. — 1957. — V. 70. — P. 97.
146. Трубицын В. П., Улинич Ф. П. // Доклады АН СССР. — 1962. — Т. 142. — С. 578.
147. Young D. A., McMahon A. K., Ross M. Equation of state and melting curve of helium to very high pressure // Phys. Rev. B. — 1981. — V. 24, No. 9. — P. 5119.
148. Meyer-ter Vehn J., Zittel W. Electronic structure of matter at high compression: Isostructural transitions and approach of the Fermi-gas limit // Phys. Rev. B. — 1988. — V. 37, No. 15. — P. 8674.
149. Ebeling W., Richert W. // Phys. Stat. Sol. (b). — 1985. — V. 128. — P. 467.
150. Ebeling W., Förster A. // High Press. Res. — 1990. — V. 4. — P. 484.
151. Юпитер. Сб. статей / Под ред. Т. Б. Герелса. — Мир, 1978.
152. Van Horn H. // Strongly Coupled Plasma Physics. — Elsevier, 1990. — P. 3.
153. Hubbard W. B. // Strongly Coupled Plasma Physics. — Elsevier, 1990. — P. 21.
154. Chabrier G., Saumon D., Hubbard W. et al. // Astrophys. J. — 1992. — V. 391. — P. 817.
155. Chabrier G., Saumon D., Hubbard W. et al. // Astrophys. J. — 1992. — V. 391. — P. 827.
156. Fortney J., Hubbard W. // Icarus. — 2003. — V. 164, No. 1. — P. 228.
157. The theory of brown dwarfs and extrasolar giant planets / Burrows A., Hubbard W. B., Lunine J. I., Liebert J. // Rev. Mod. Phys. — 2001. — V. 73, No. 3. — P. 719.
158. Gudkova T., Zharkov V. Models of Jupiter and Saturn after Galileo mission // Planetary and Space Science. — 1999. — V. 47, No. 10-11. — P. 1201.
159. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas / Ebeling W., Förster A., Fortov V. et al. — Stuttgart-Leipzig: Teubner, 1991.
160. Saumon D., Chabrier G., Van Horn H. M. // Astrophys. J. (Suppl.). — 1995. — V. 99. — P. 713.
161. Winisdoöffer C., Chabrier G. Free-energy model for fluid helium at high density // Phys. Rev. E. — 2005. — V. 71. — P. 026402.
162. Equation of state for dense hydrogen and helium: application to astrophysics / Redmer R., Holst B., Juranek H. et al. // J. Phys. A: Math. Gen. — 2006. — V. 39, No. 17. — P. 4479.
163. Фазовый переход в сильно вырожденной плазме / Филинов В. С., Фортвов В. Е., Бониц М., Левашов П. Р. // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — Т. 74, № 7-8. — С. 384.
164. Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas / Filinov V. S., Bonitz M., Levashov P et al. // J. Phys. A: Math. Gen. — 2003. — V. 36, No. 22. — P. 6069.
165. Monte Carlo Results for the Hydrogen Hugoniot / Bezkrivnyy V., Filinov V. S., Kremp D. et al. // Phys. Rev. E. — 2004. — V. 70, No. 5. — P. 057401.
166. Scandolo S. // Proc. Nat. Ac. Sci. — 2003. — V. 100. — P. 3051.

167. Bonev S. A., Militzer B., Galli G. Ab initio simulations of dense liquid deuterium: Comparison with gas-gun shock-wave experiments // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69, No. 1. — P. 014101.
168. Bonev S., Schwegler E., Ogitsu T., Galli G. // Nature. — 2004. — V. 431. — P. 669.
169. Jakob B. Die Beschreibung von dichtem Wasserstoff mit der Methode der Wellenpaket-Molekulardynamik: Ph.D. thesis / Erlangen University. — 2006.
170. Wave packet simulation of dense hydrogen / Jakob B., Reinhard P.-G., Töpffer C., Zwicknagel G. // Phys. Rev. E. — 2007. — V. 76, No. 3. — P. 036406.
171. Копышев В. П., Хрусталеv В. В. // ПМТФ. — 1980. — Т. 1. — С. 122.
172. Копышев В. П., Урлин В. Д. // Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. — М.: Наука, 2000. — С. 297.
173. Phase transition in dense low-temperature molecular gases / Mulenko I., Olejnikova E., Khomkin A. et al. // Phys. Lett. A. — 2001. — V. 289, No. 3. — P. 141.
174. Förster A., Ebeling W., Richert W. // High Pressure Geosciences and Material Synthesis / Ed. by H. Vollstadt. — Berlin: Akademie-Verlag, 1988. — P. 84.
175. Ross M., McMahon A. K. Condensed xenon at high pressure // Phys. Rev. B. — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1658.
176. Keeler R. K., van Thiel M., Alder B. J. // Physica. — 1965. — V. 31. — P. 1437.
177. Nellis W. J., van Thiel M., Mitchell A. C. Shock Compression of Liquid Xenon to 130 GPa (1.3 Mbar) // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 48, No. 12. — P. 816.
178. Минцев В. Б., Фортov В. Е. // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 30. — С. 401.
179. Запорожец Ю. Б., Минцев В. Б., Фортov В. Е., Батовский О. М. // Письма в ЖТФ. — 1984. — Т. 10, № 21. — С. 133.
180. Фортov В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т. Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
181. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред В. Фортова. — М.: Наука, 2000.
182. Максимов Е. Г., Шилоv Ю. И. Водород при высоких давлениях (Обзоры актуальных проблем) // УФН. — 1999. — Т. 149, № 11. — С. 1223.
183. Ternovoi V. Y., Fortov V. E. et al. Thermodynamic Properties and Electric Conductivity of Hydrogen under Multiple Shock Compression to 150 GPa // Physica B: Condens. Matter. — 1999. — V. 265, No. 1/4. — P. 6.
184. Nellis W. J. Dynamic compression of materials: metallization of fluid hydrogen at high pressures // Rep. Progr. Phys. — 2006. — V. 69, No. 5. — P. 1195.
185. Экспериментальное измерение сжимаемости, температуры и поглощения света в ударно-сжатом плотном газообразном дейтерии / Гришечкин С. К., Груздев С. К., Грязнов В. К. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 6. — С. 452.
186. Mochalov M. A., Zhernokletov M. V. et al. Study of Thermodynamical and Optical Properties of Deuterium under Shock and Adiabatic Compression // In Theses Int. Conf. on Strongly Coupled Coulomb Systems, p.35. Moscow. — 2005.
187. Observation of Electrical Conductivity of Isentropically Compressed Hydrogen at Megabar Pressures / Hawke P. S., Burgess T. J., Duerre D. E. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1978. — V. 41, No. 14. — P. 994.
188. Pavlovski A. I., Boriskov G. V. et al. Isentropic Solid Hydrogen Compression by Ultrahigh Magnetic Field Pressure in Megabar Range // Megagauss Technology and Pulsed Power Applications / Ed. by C. M. Fowler et al. — N.Y., London: Plenum, 1987. — P. 255.

189. Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений / *Фортов В., Терновой В., Жерноклетов М. и др.* // ЖЭТФ. — 2003. — Т. 124, № 2. — С. 288.
190. Phase Transition in Strongly Degenerate Hydrogen Plasma / *Filinov V. S., Fortov V. E., Bonitz M., Levashov P. R.* // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — В. 74, No. 7. — P. 422.
191. Calculation of the shock Hugoniot of deuterium at pressures above 1 Mbar by the path-integral Monte Carlo method / *Filinov V., Levashov P., Bonitz M., Fortov V.* // Plasma Phys. Rep. — 2005. — V. 31. — P. 700.
192. Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas / *Filinov V. S., Bonitz M., Levashov P. et al.* // J. Phys. A: Math. Gen. — 2003. — V. 36, No. 22. — P. 6069.
193. Monte Carlo results for the hydrogen Hugoniot / *Bezkravnyy V., Filinov V. S., Kremp D. et al.* // Phys. Rev. E. — 2004. — V. 70. — P. 057401.
194. *Зельдович Я. Б., Ландау Л. Д.* Корреляция между жидкими и газообразными состояниями металлов // ЖЭТФ. — 1944. — Т. 14. — С. 32.
195. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas / *Ebeling V., Förster A., Fortov V. et al.* // Teubner Verlagsgesellschaft, Berlin-Stuttgart. — 1991.
196. *Осипьян Ю. А., Авдонин Б. В. и др.* Немонотонное изменение электропроводности кристаллов фуллерена  $C_{60}$  при динамическом сжатии до 300 кбар как свидетельство аномально сильного понижения энергетического барьера для полимеризации  $C_{60}$  при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ. — 2005. — Т. 81, № 9. — С. 587.
197. Анализ малых примесей тяжелых элементов в солнечной плазме с помощью уравнений состояния SAHA-S / *Аюков С., Батулин В., Грязнов В. К. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 3. — С. 163.
198. Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropic Compression at Megabar Pressures / *Fortov V. E., Ilkaev R. I., Arinin V. A. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2007. — V. 99, No. 18. — P. 185001.
199. Thermophysical Properties of Shock Compressed Argon and Xenon / *Fortov V. E., Gryaznov V. K., Mintsev V. B. et al.* // Contributions to Plasma Physics. — 2001. — V. 41, No. 2-3. — P. 215.
200. Conductivity of Nonideal Plasma / *Fortov V., Mintsev V. B., Ternovoi V. Y. et al.* // Contributions to Plasma Physics. — 2004. — V. 8, No. 3. — P. 447.
201. *Wigner E.* On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. — 1934. — V. 46, No. 11. — P. 1002.
202. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: The plasma phase transition // Phys. Rev. Lett. — 1989. — V. 62, No. 20. — P. 2397.
203. *Bonitz M., Mullenko I. A. et al.* Phase Transition in Superdense Hydrogen and Deuterium Plasma // Phys. Rep. — 2001. — V. 27. — P. 1025.
204. *Ebeling W., Richert W.* Plasma phase transition in hydrogen // Phys. Lett. A. — 1965. — V. 108, No. 2. — P. 80.
205. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization // Phys. Rev. A. — 1992. — V. 46, No. 4. — P. 2084.
206. *Baus M., Hansen J.* Statistical mechanics of simple coulomb systems // Phys. Rep. — 1980. — V. 59, No. 1. — P. 1.
207. *Заббахин Е. И., Заббахин И. Е.* Явления неограниченной кумуляции. — М.: Наука, 1988.
208. Взрывные лабораторные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах / *Алтышулер Л. В., Трунин Р. Ф., Крупников К. К., Панов Н. В.* // УФН. — 1996. — Т. 166, № 5. — С. 575.

209. Начало физики мегабарных давлений / *Альтшулер Л. В., Крупников К. К., Фортвов В. Е., Фунтиков А. И.* // Вестник РАН. — 2004. — Т. 74, № 11. — С. 1011.
210. *Базанов О., Беспалов В. и др.* Нерегулярное отражение конических сходящихся ударных волн в плексигласе и меди // ТВТ. — 1985. — Т. 23, № 5. — С. 976.
211. Thermophysical Properties of Shock Compressed Argon and Xenon / *Fortov V., Gryaznov V., Mintsev V. et al.* // Contributions to Plasma Physics. — 2001. — V. 41, No. 2-3. — P. 215.
212. Conductivity of Nonideal Plasma / *Fortov V. E., Mintsev V. B., Ternovoi V. Y. et al.* // J. High Temperature Material Processes. — 2004. — V. 8, No. 3. — P. 447.
213. *Минцев В. Б., Фортвов В. Е.* Электропроводность ксенона в закритических условиях // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 30, № 7. — С. 401.
214. *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 1972. — Т. 16, № 5. — С. 286.
215. *Иосилевский И. Л.* Особенности фазовых превращений в недрах астрофизических объектов // Физика экстремальных состояний вещества / Под ред. В. Е. Фортвова. — Черногловка, М.: ИХПФ, 2007. — С. 241243.
216. *Stevenson D., Salpeter E.* // Astrophys. J. — 1977. — V. 35. — P. 221.
217. *Гришечкин С., Грязнов В. К., Жерноклетов М. В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80. — С. 452.
218. Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques / *Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E. et al.* // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69, No. 14. — P. 144209.
219. *Loubeyre P., Le Toullec R., Pinceaux J. P.* Binary phase diagrams of  $H_2$ -He mixtures at high temperature and high pressure // Phys. Rev. B. — 1987. — V. 36, No. 7. — P. 3723.
220. *Pfaffenzeller O., Hohl D., Ballone P.* Miscibility of Hydrogen and Helium under Astrophysical Conditions // Phys. Rev. Lett. — 1995. — V. 74, No. 13. — P. 2599.
221. Non-congruent phase coexistence in strongly coupled chemically reactive plasmas / *Iosilevskiy I., Gryaznov V., Yakub E. et al.* // Contrib. Plasma Phys. — 2003. — V. 43, No. 5-6. — P. 316.
222. *Иосилевский И. Л., Грязнов В. К. и др.* // Вопросы Атомной Науки и Техники. — 2003. — Т. 61, № 1. — С. 3.
223. *Ronchi C., Iosilevskiy I., Yakub E.* Equation of State of Uranium Dioxide. — Berlin: Springer, 2004.
224. *Украинец А. В., Иосилевский И. Л.* Особенности реализации гипотетического плазменного фазового перехода в недрах Сатурна и Юпитера // Физика Экстремальных Состояний Вещества. — Черногловка: ИПХФ РАН, 2005.
225. *Iosilevski I., Chigvintsev A.* // Journal de Physique. — 2000. — V. 4, No. 10. — P. 451.
226. Неконгруэнтное фазовое равновесие в высокотемпературных продуктах нагрева диоксида урана / *Иосилевский И. Л., Грязнов В. К., Семенов А. М. и др.* // Известия РАН. Серия «Энергетика». — 2011. — № 5. — С. 115.
227. Уравнение состояния диоксида урана, 63(11) 2258 (1999); / *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Семенов А. М. и др.* // Известия РАН, Серия физическая. — 1999. — Т. 63, № 11. — С. 2258.
228. *Иевлев В. М.* // Известия АН СССР, Серия Энергетика и транспорт. — 1977. — Т. 6, № 6. — С. 24.

229. Теплофизические свойства рабочих сред газозофазного ядерного реактора / *Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Красников Ю. Г. и др.*; Под ред. В. М. Иевлева. — М.: АТОМИЗДАТ, 1980.
230. *Иосилевский И. Л., Кузнецова Н. И.* // Ракетная и космическая техника. — 1975. — № 25–26. — С. 341.
231. Ядерные ракетные двигатели / *Демянко Ю. Г., Конюхов Г. В., Коротеев А. С. и др.* — М.: Норма-Информ, 2001.
232. Ракетные двигатели и энергетические установки на основе ядерного реактора / *Коротеев А.С., Пришлецов А.Б., Мартишин В.М. и др.* — М.: Машиностроение, 2002.
233. *Иосилевский И. Л.* Неконгруэнтные фазовые переходы в плазме астрофизических объектов // IX Харитоновские тематические научные чтения. — 2007.
234. *Ohse R. W., Babelot J.-F. et al.* // Journal of Nuclear Materials. — 1985. — V. 130. — P. 165.
235. *Fischer E. A.* Reports KfK 4084. — Karlsruhe, 1987.
236. *Fischer E. A.* Reports KfK 4889. — Karlsruhe, 1992.
237. *Fischer E. A.* // Nucl. Sci. Eng. — 1989. — V. 101. — P. 97.
238. *Bober M., Breitung W. et al.* // Journal of Nuclear Materials. — 1976. — V. 60. — P. 20.
239. *Green D., Leibovitz L. J.* // Journal of Nuclear Materials. — 1982. — V. 105. — P. 184.
240. *Iosilevski I. L., Hyland G. J., Ronchi C., Yakub E. S.* // Trans. Amer. Nucl. Soc. — 1999. — V. 81. — P. 122; Int. J. Thermophys. — 2001. — V. 22. — С. 1253.
241. *Башарин А. Ю.* Исследование неконгруэнтного испарения диоксида урана // Тезисы Конф. ТСВ-2002. — Казань, 2002. — С. 172.
242. *Башарин А. Ю., Брыкин М. В. и др.* // ТВТ. — 2004. — Т. 42(1). — С. 64.
243. *Breitung W., Reil K. O.* Report KfK 3939: Tech. rep. — Karlsruhe: KfK, 1985.
244. *Breitung W., Reil K. O.* // Nucl. Sci. Eng. — 1989. — V. 101. — P. 26.
245. *Breitung W., Reil K. O.* // Nucl. Sci. Eng. — 1990. — V. 105. — P. 205.
246. *Bober M., Singer J.* // Nucl. Sci. Eng. — 1987. — V. 97. — P. 344.
247. *Иосилевский И. Л.* Физика неидеальных кулоновских систем. — Saarbrücken: LAMBERT Ac. Publ., 2011.

**ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ**

Из содержания предыдущих глав следует, что описание термодинамических свойств неидеальных сред требует привлечения сложных моделей, которые ввиду их узкой специализации применимы в ограниченной области параметров состояния вещества. Как правило, эти модели связаны с громоздкими квантово-механическими численными расчетами, а получаемая с их помощью информация существует в виде графиков или обширных таблиц, что затрудняет использование этих данных в практических расчетах. Такие уравнения состояния иногда называют «глобальными» [1], они основаны, как правило, на расчетах по современным мощным теоретическим моделям отдельных областей фазовой диаграммы. Полученные таблицы термодинамических функций затем гладко сшиваются между собой с помощью процедуры интерполяции.

Альтернативный способ описания свойств неидеальных сред в широком диапазоне параметров заключается в конструировании полуэмпирических моделей [2–4], в которых общий вид функциональных зависимостей устанавливается на основании теоретических соображений, а данные эксперимента используются для определения численных значений коэффициентов в этих зависимостях.

Описание динамических адиабат и безразмерные уравнения состояния представлены в работах [5–10].

Можно сказать, что современные полуэмпирические модели УРС для широкой области фазовой диаграммы используют аналитические и интерполяционные зависимости строгих теорий, в том числе и «первопринципных», и в существенной степени опираются на данные экспериментальных измерений. В этих моделях функциональные зависимости термодинамического потенциала выбираются исходя из теоретических предположений, а конкретные константы подбираются из условия описания экспериментальных либо теоретических данных. При этом численные коэффициенты в этих формулах разделяются на две группы: в первой группе коэффициенты являются внутренне присущими данному веществу константами, в том числе и фундаментальными, типа заряда и массы ядра, нормальной плотности, модуля сжатия в нормальных условиях и т. п.; во второй группе — подгоночными параметрами, выбираемыми из условия наилучшего описания совокупности экспериментальных данных и теоретических расчетов при высоких давлении и температуре.

### 9.1. Квазигармоническое приближение

Наиболее традиционным в полуэмпирических моделях является разделение термодинамического потенциала — например, свободной энергии, на холодную составляющую  $E_c(V)$  и определяемые термическим возбуждением тепловые члены. В свою очередь тепловые компоненты представляются в виде суммы вкладов теплового движения атомов или молекул кристаллической решетки  $F_a(V, T)$  и вклада термически возбужденных электронов проводимости  $F_e(V, T)$ , что приводит к общему выражению

$$F(V, T) = E_c(V) + F_a(V, T) + F_e(V, T), \quad (9.1)$$

где конкретный вид и форма записи отдельных членов зависят от общности соответствующих полуэмпирических моделей.

Для вычисления  $F_a(V, T)$  широко используется квазигармоническое приближение, согласно которому кристалл представляет собой совокупность  $3N$  гармонических осцилляторов с нормальными частотами колебаний  $\omega_i$ , зависящими только от объема  $V$ . Тепловые энергия и давление такого кристалла имеют вид

$$\varepsilon_a(V, T) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i/kT) - 1}, \quad (9.2)$$

$$p_a(V, T) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\gamma_i}{V} \frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i/kT) - 1}, \quad (9.3)$$

где  $\gamma_i = -d \ln \omega_i / d \ln V$ . Свободная энергия определяется выражением

$$F_a(V, T) = kT \sum_{i=1}^{3N} \ln \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\hbar\omega_i}{kT} \right) \right], \quad (9.4)$$

или, переходя в выражении (9.4) от суммирования к интегрированию,

$$F_a(V, T) = kT \int Z(\omega) \ln \left[ 1 - \exp \left( -\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \right] d\omega, \quad (9.5)$$

В выражении (9.5) весовая функция  $Z(\omega)$  задает спектр колебаний атомов решетки, реальный вид которого и его зависимость от объема чрезвычайно сложны, поэтому конкретное вычисление  $F_a$  возможно лишь после введения дополнительных модельных упрощений. Модель Дебая задает фононный спектр в акустическом приближении, которое справедливо для слабых звуковых волн:

$$Z(\omega) = \begin{cases} \frac{\omega^2}{2\pi} \left( \frac{1}{c_1^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) & \text{при } \omega \leq \omega_D, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_D, \end{cases} \quad (9.6)$$

где  $c_l$  и  $c_t$  продольная и поперечная скорости звука, а дебаевская частота  $\omega_D$  определяется условием нормировки на общее число мод колебаний:

$$V \int_0^{\omega_D} Z(\omega) d\omega = 3N. \quad (9.7)$$

В этом случае после введения новых обозначений  $R = kN$  и  $\theta = \hbar\omega_D/k$  выражение (9.5) для свободной энергии приобретает вид

$$F_a(V, T) = RT \left( 3 \ln \left\{ 1 - \exp \left[ -\frac{\theta(V)}{T} \right] \right\} - D \left[ \frac{\theta(V)}{T} \right] \right), \quad (9.8)$$

где

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3 dt}{\exp t - 1}. \quad (9.9)$$

Тепловые составляющие энергии и давления равны, соответственно,

$$\varepsilon_a(V, T) = 3RTD \left[ \frac{\theta_D(V)}{T} \right], \quad (9.10)$$

$$p_a(V, T) = \frac{\gamma(V)}{V} 3RTD \left[ \frac{\theta_D(V)}{T} \right], \quad (9.11)$$

причем дебаевская  $D(\theta_D/T)$  функция обеспечивает низкотемпературную,  $C_V \sim T^3$ , и высокотемпературную,  $C_V \sim 3R$ , асимптотики для теплоемкости решетки, а  $\gamma = -d \ln \theta_D / d \ln V$  — коэффициент Грюнайзена, который является функцией только объема. В дебаевской модели твердое тело предполагается однородным и изотропным, а тепловые возбуждения кристалла сводятся к звуковым волнам с плотностью  $Z(\omega)$ . При этом действие внешнего давления сказывается на изменении граничной частоты  $\omega_D(V)$ , в то время как сам спектр остается гармоническим и имеет вид (9.6).

Сравнительно невысокая температура, возникающая при ударно-волновом сжатии вещества до давления в десятки мегапаскалей, позволяет пренебречь в уравнении состояния (9.1) вкладом термического возбуждения электронов и успешно применить для описания термодинамики твердого тела в этой области фазовой диаграммы квазигармоническую модель (9.2)–(9.11) в форме калорического уравнения состояния Ми–Грюнайзена:

$$p(V, \varepsilon) = p_c(V) + \frac{\gamma(V)}{V} [\varepsilon - \varepsilon_c(V)], \quad (9.12)$$

где  $p_c = -d\varepsilon_c(V)/dV$ , а для модели Дебая  $\varepsilon_c(V) = \varepsilon_0(V) + (9/8)\theta_D(V)$  является суммой упругой энергии кристалла  $\varepsilon_0$  при  $T = 0$  и энергии нулевых колебаний атомов.

Знание экспериментальной ударной адиабаты вещества,

$$p = p_H(V), \quad (9.13)$$

вместе с законом сохранения энергии на ударном скачке (полагая  $\varepsilon_0 = 0$ ,  $p_H \gg p_0$ ) в виде

$$\varepsilon_H = \frac{1}{2} p_H (V_0 - V) \quad (9.14)$$

и уравнением Ми–Грюнайзена (9.12) позволяет при введении дополнительных модельных предположений о зависимости  $\gamma(V)$  определить характеристики холодной кривой  $\varepsilon_c$ . В рамках квазигармонической модели при заданной форме вклада электронного компонента (при невысоком значении температуры обычно полагают  $F_e = 0$ ) это дает возможность получить термодинамически полное описание вещества.

Наиболее очевидным образом параметры холодной кривой могут быть получены из ударно-волновых данных при допущении  $\gamma/V = \text{const}$ , широко используемом в работах американских исследователей (см., например, работу [11]). Это упрощение приводит систему (9.12)–(9.14) к дифференциальному уравнению первого порядка относительно неизвестной функции  $\varepsilon_c(V)$ :

$$p_H(V) = -\varepsilon'_c + \frac{\gamma_0}{V_0} [\varepsilon_H(V) - \varepsilon_c].$$

Температура, замыкающая термодинамическое описание, непосредственно находится из уравнения (9.10), поскольку зависимость дебаевской температуры от объема принимает простой вид:

$$\theta_D(V) = \theta_{D0} \exp \left[ \gamma_0 \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right) \right],$$

где  $\theta_{D0}$  и  $\gamma_0$  соответствуют нормальным условиям.

Условие  $\gamma/V = \text{const}$ , хорошо описывающее данные экспериментальных измерений при умеренном сжатии  $V_0/V \leq 1,5$ , приводит к очень быстрому уменьшению  $\gamma$  при дальнейшем уменьшении объема, что находится в противоречии с теоретическими представлениями и опытными данными. Более подходящим является соотношение  $\gamma/\sqrt{V} = \text{const}$ , хотя и оно не дает нужной асимптотики  $\gamma \rightarrow 2/3$  при  $V \rightarrow 0$ . Наконец, прямая экспериментальная проверка применимости аппроксимации  $\gamma/V^q = \text{const}$ , выполненная в статических условиях при невысокой степени сжатия вещества  $V_0/V \leq 1,2$  [12], приводит к самым различным степеням  $q$ , от 0,6 (Fe) до 1,8 (In).

Для описания объемной зависимости коэффициента Грюнайзена предложен ряд интерполяционных выражений, обладающих требуемой асимптотикой,  $\gamma(V \rightarrow 0) = 2/3$ , с малым значением производной  $d\gamma/dV$  при  $V = V_0$ ,

$$\gamma(V) = \gamma_0 \frac{V}{V_0} + \frac{2}{3} \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right),$$

или большим,

$$\gamma(V) = \gamma_0 \frac{V}{V_0} + \frac{2}{3} \left( 1 - \frac{V}{V_0} \right)^2,$$

а также другие соотношения, содержащие подгоночный параметр для более точного описания экспериментальных данных. Проводить гидродинамические

расчеты в широкой области фазовой диаграммы позволяет аппроксимационная зависимость [13]

$$\gamma(V) = \frac{2}{3} + \left( \gamma_0 - \frac{2}{3} \right) \frac{1 + \sigma_m^2}{\sigma^2 + \sigma_m^2} \sigma,$$

где  $\sigma = V_0/V$  — степень сжатия. Такая форма записи удовлетворяет асимптотике  $\gamma = 2/3$  в пределах большого сжатия и малой плотности, а также дает правильное значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях и учитывает на основе данных по ударному сжатию пористых образцов характерные особенности поведения этого параметра, причем значения  $\sigma_m$  для различных веществ лежат в пределах 0,5–0,9. Наиболее распространенным способом представления результатов динамического эксперимента при умеренном сжатии является линейная зависимость между скоростью фронта волны и скоростью движения вещества [3],  $D = c_0 + \lambda u$ , что приводит к простому виду ударной адиабаты:  $p_H(V) = c_0^2(V - V_0)/[(V_0 - \lambda(V_0 - V))]^2$ . Наличие касания второго порядка между ударной адиабатой и нормальной изоэнтропой [2] позволяет, пренебрегая прочностными эффектами при ударно-волновом нагружении, связать параметры линейного соотношения  $D(u)$  с термодинамическими характеристиками при нормальных условиях:

$$c_0 = \sqrt{V_0 B_{s0}}, \quad \lambda = \frac{1}{4}(B'_{s0} + 1), \quad (9.15)$$

где  $B_{s0}$  и  $B'_{s0}$  — значения при нормальных условиях адиабатического модуля объемного сжатия  $B_s = -V(\partial p/\partial V)_s$  и его изоэнтропической производной по давлению  $B'_s = (\partial B_s/\partial p)_s$ . Как следует из сопоставления данных статических и динамических экспериментов, для веществ, имеющих плотно упакованные структуры, соотношения (9.15) выполняются с хорошей точностью. В случае же наличия структурных фазовых переходов при сжатии эти соотношения нарушаются, поскольку найденные по результатам динамических экспериментов  $c_0$  и  $\lambda$  относятся к фазе высокого давления.

Другой способ определения параметров холодной кривой из ударно-волновых данных с помощью уравнения состояния Ми–Грюнайзена основан на использовании различных вариантов теории малых колебаний, согласно которой закон изменения коэффициента Грюнайзена от объема связывается с характеристиками холодной кривой и в обобщенной форме задается в виде

$$\gamma(V) = \frac{t-2}{3} - \frac{V}{2} \frac{(p_c V^{2t/3})''_{VV}}{(p_c V^{2t/3})'_V}, \quad (9.16)$$

где индекс  $s$  относится к упругому компоненту ( $T = 0$ );  $t = 0$  соответствует приближению Слэтера–Ландау,  $t = 1$  — Дугдейла–Макдональда,  $t = 2$  — теории свободного объема Ващенко–Зубарева [2]. Различные варианты при  $p_c = 0$  дают близкие значения коэффициента Грюнайзена,  $\gamma^{SL} = \gamma^{DM} + 1/3 = \gamma^{VZ} + 2/3$ , причем при сжатии это различие уменьшается и, в случае изменения давления по закону  $p_c \sim \sigma^n$  при  $\sigma \rightarrow \infty$ , все расчетные значения  $\gamma$  стремятся к общему пределу,  $\gamma_\infty = (n - 1/3)/2$ . В практических вычислениях обычно используют формулы Слэтера–Ландау или Дуг-

дейла–Макдональда, которые дают наиболее близкие к экспериментальному значения  $\gamma_0 = \gamma(V_0)$ . Однако, как показывает сопоставление различных расчетных кривых  $\gamma(V)$  с опытными данными для алюминия и бериллия, ни одна из модификаций выражения (9.16) не обеспечивает решающего преимущества в описании результатов динамических экспериментов. В общем случае оптимальное значение параметра  $t$  может быть и нецелочисленным.

Известный экспериментальный факт линейной связи между волновой и массовой скоростью,  $D = C_0 + \lambda u$  [3, 14], приводит к уравнению ударной адиабаты, имеющему вид

$$p(V) = \frac{C_0^2(V_0 - V)}{(V_0 - \lambda(V_0 - V))^2}.$$

Это позволяет по известной методике [2, 14], учитывающей наличие касания третьего порядка между ударной адиабатой и нулевой изоэнтропой, приближенно связать параметр  $t$  с измеряемыми экспериментально величинами — коэффициентом Грюнайзена  $\gamma_0 = \gamma(V_0)$  и наклоном адиабаты  $\lambda$ :

$$\gamma_0 = 2\lambda - \frac{2+t}{3}.$$

Возможны также и другие многочисленные способы определения  $t$  из данных статических и динамических измерений [15, 16]. Сопоставление различных способов расчета  $\gamma(V)$  с экспериментальными данными для алюминия [17] показывают, однако, что ни одна из квазигармонических моделей не обеспечивает решающего преимущества в описании динамического эксперимента [15, 16]. Столь же неудовлетворительные результаты при сравнении с данными [17] дает и часто используемая в расчетах простейшая аппроксимация  $\gamma/V = \text{const}$ . Дополнительно отметим, что применение для расчета  $\gamma(V)$  формулы (9.16) допустимо, строго говоря, только для изотропных или имеющих кубическую симметрию структур, в общем же случае необходимо учитывать тензорный характер коэффициента Грюнайзена. Способ определения коэффициента Грюнайзена для ряда металлов кубической и гексагональной симметрии по измеряемым упругим константам и их производным по давлению рассмотрен в работе [18]. Подчеркнем еще раз, что решение в полном объеме задачи о поведении  $\gamma(V)$  возможно только с учетом реального спектра частот колебаний в кристалле (см. гл. 3).

Уравнение состояния Ми–Грюнайзена (9.12), дополненное известной ударной адиабатой вещества и определением коэффициента Грюнайзена согласно обобщенной формуле (9.16), приводит к дифференциальному уравнению третьего порядка относительно энергии упругого сжатия  $\varepsilon_c(V)$ . Это уравнение может быть решено численно, с заданными начальными условиями:

$$\varepsilon_c(V_{0c}) = 0, \quad (9.17)$$

$$p_c(V_{0c}) = 0, \quad (9.18)$$

$$B_c(V_{0c}) = B_{0c}, \quad (9.19)$$

где  $V_{0c}$  — значение удельного объема при  $p_c = 0$  и  $T = 0$ ,  $B_{0c}$  — значение модуля упругого сжатия,  $B_c = -V dp_c/dV$  при  $V = V_{0c}$ . Для решения системы

необходимо предварительно привести термодинамические параметры исходного состояния на ударной адиабате к начальному состоянию на нулевой изотерме, т. е. определить значения  $V_{0c}$  и  $B_{0c}$ .

Предложенная методика расчета величины  $\varepsilon_c(V)$  не позволяет, однако, на практике однозначно найти зависимость коэффициента Грюнайзена от объема, поскольку необходимые для этого значения производных от  $p_c$  определяются на основе экспериментальной ударной адиабаты, которая сама по себе не несет надежной информации о производных. При этом, как показано в работе [19], различные аналитические выражения для ударной адиабаты, одинаково хорошо описывающие исходные экспериментальные данные, дают качественно разный характер изменения  $\gamma(V)$ .

Альтернативный способ построения уравнений состояния различных веществ и описания данных ударно-волновых измерений сводится к полуэмпирической форме определения холодной кривой в виде аналитической зависимости давления от степени сжатия,  $\sigma_c = V_{0c}/V$ . Подгоночные параметры в таких зависимостях должны обеспечивать выполнение условий (9.18) и (9.19), а также соответствовать заданному значению производной изотермического модуля объемного сжатия по давлению при  $T = 0$ :

$$\left. \frac{dB_c}{dp} \right|_{V=V_{0c}} = B'_{0c}, \quad (9.20)$$

значение которого может быть определено экспериментально из данных по измерению изотермической сжимаемости или из ультразвуковых измерений.

Наиболее простой потенциал Мурнагана при замене  $B_p$  на  $B'_{0c}$  удовлетворяет всем трем условиям (9.18)–(9.20). Простота этого потенциала позволяет записать уравнение Ми–Грюнайзена в экономном алгебраическом виде [20] (здесь  $n = B'_{0c}$ ),

$$p(V, \varepsilon) = \frac{B_{0c}}{n} \left[ \sigma_c^n \left( 1 - \frac{\gamma_0}{n-1} \right) - \gamma_0 - 1 \right] + \gamma_0 \left[ \frac{\varepsilon}{V} + \frac{B_{0c}\sigma_c}{n-1} \right],$$

обеспечивающем малые затраты времени расчета на ЭВМ при удовлетворительной точности описания области не очень высокого давления. При этом значение параметра  $n$  выбирается из условия наилучшего описания экспериментальной ударной адиабаты.

При описании статических и динамических экспериментальных данных используются и более сложные потенциалы, форма которых выводится на основании различных физических моделей. Следует упомянуть помимо потенциалов Берча и Мурнагана широко применяемые потенциалы Морзе:

$$p_c(V) = A\sigma_c^{2/3} \left\{ \exp \left[ 2\alpha \left( 1 - \sigma_c^{-1/3} \right) \right] - \exp \left[ \alpha \left( 1 - \sigma_c^{-1/3} \right) \right] \right\}; \quad (9.21)$$

Борна–Майера:

$$p_c(V) = Q \left\{ \sigma_c^{2/3} \exp \left[ q \left( 1 - \sigma_c^{-1/3} \right) \right] - \sigma_c^{4/3} \right\}; \quad (9.22)$$

Розе:

$$p_c(V) = 3B_{0c} \left(1 - \sigma_c^{-1/3}\right) \sigma_c^{2/3} \exp \left\{ \frac{3}{2} (B'_{0c} - 1) \left[1 - \sigma_c^{-1/3}\right] \right\}; \quad (9.23)$$

Парсафара–Масона:

$$p_c(V) = \frac{1}{2} B_{0c} \left[ (B'_{0c} - 7) - 2(B'_{0c} - 6)\sigma_c + 5(B'_{0c} - 5)\sigma_c^2 \right] \sigma_c^2, \quad (9.24)$$

которые удовлетворяют условию (9.18) и содержат коэффициенты  $A$ ,  $\alpha$ ,  $Q$  и  $q$ , определяемые согласно (9.19) и (9.20). Потенциал Борна–Майера, следующий из теории ионных кристаллов, дает лучшие результаты при описании данных по ударной сжимаемости различных веществ. При его использовании были получены уравнения состояния ряда металлов и минералов. Потенциал Берча–Мурнагана, полученный на основании теории конечных деформаций, обычно применяется при обработке экспериментов с измерением изотермической сжимаемости, но в то же время он имеет и хорошие экстраполяционные свойства к расчетам по модели Томаса–Ферми при большом сжатии. Потенциал Розе при интегрировании по  $V$  дает значения энергии сублимации в пределах 10–30% от табличной величины и не содержит подгоночных коэффициентов. Этим его достоинства заканчиваются, так как экспоненциальная зависимость при сжатии оказывается чрезмерно «жесткой». И хотя авторы декларируют применимость выражения (9.23) для расчета процессов инерциального термоядерного синтеза, такой потенциал не обеспечивает правильной асимптотики  $\sigma_c^{5/3}$  в пределе большого сжатия, и его использование для построения широкодиапазонных уравнений состояния, очевидно, нецелесообразно. Данное замечание относится и к последнему по времени появления потенциалу (9.24) Парсафара–Масона.

В некоторых случаях вместо выполнения дополнительного условия (9.20) проводился подбор параметра  $t$  в определяющей коэффициент Грюнайзена формуле (9.16) при совместных условиях наилучшего описания ударно-волновых данных и равенства  $\gamma(V_{0c}) = \gamma_0$ . Это, фактически, эквивалентно замене в формуле (9.20) значения  $B$  на значение  $B_{0s} = 4\lambda - 1$  и выполнению следующего при этом из формулы (9.16) соотношения:

$$t = 3(2\lambda - \gamma_0) - 2.$$

Существуют также и другие способы определения параметра  $t$  по экспериментальной зависимости коэффициента Пуассона от давления, полученной на основе ультразвуковых измерений или критерия Линдемманна, связывающего наклон кривой плавления с коэффициентом Грюнайзена.

Преимуществом представления кривых холодного сжатия потенциалами (9.21), (9.22) является их регулярный характер, обеспечивающий монотонный ход зависимости коэффициента Грюнайзена от объема согласно формуле (9.16). Однако на практике расчетные значения уже при  $\sigma_c = 1,5$ –2 оказываются в заметном противоречии с данными экспериментов по ударному сжатию и не соответствуют теоретическим представлениям об асимптотическом поведении при  $\sigma \rightarrow \infty$ . Это ограничивает область применимости полученных

потенциальных кривых и приводит к необходимости их сшивки с выражениями, соответствующими квантово-статистическим асимптотикам.

Удобным способом представления кривой холодного сжатия является аппроксимационное разложение в ряд по степеням обратного межатомного расстояния,  $r_a^{-1} \sim \sigma_c^{1/3}$  [21]:

$$p_c(V) = \sum_{i=1}^N a_i \sigma_c^{1+i/3}, \quad (9.25)$$

где для нахождения коэффициентов  $a_i$  используются условия (9.18), (9.19) и ряд дополнительных требований, количество которых определяет максимальное число членов разложения  $N$ . В качестве этих требований накладываются условия на табличные значения энергии сублимации [19, 21],

$$\varepsilon_c(V \rightarrow \infty) - \varepsilon_c(V_{0c}) = \varepsilon_{\text{sub}}, \quad (9.26)$$

и коэффициента Грюнайзена по какой-либо модификации формулы (9.16), обычно [21] в форме Слэтера–Ландау:

$$\gamma^{\text{SL}}(V_{0c}) = \gamma_0. \quad (9.27)$$

Также требуется соответствие холодной кривой и ее наклона и результатов расчета по квантостатистическим моделям при  $\sigma_c = \sigma^*$ :

$$p_c(\sigma^*) = p^*, \quad (9.28)$$

$$\left. \frac{dp_c}{d\sigma} \right|_{\sigma_c = \sigma^*} = c^*, \quad (9.29)$$

где значение  $\sigma^*$  выбиралось из условия  $p_c(\sigma^*) \approx 300$  ТПа, характерного для применимости этих моделей давления. Система шести уравнений (9.18), (9.19), (9.26)–(9.29) определяет шесть коэффициентов  $a_i$  ряда (9.25). Для улучшения точности описания экспериментальных данных может быть добавлен седьмой член ряда и наложено дополнительное условие на параметры опорной экспериментальной точки на ударной адиабате [19, 21].

Полученные таким образом холодные кривые позволяют, согласно выражению (9.16), производить расчет коэффициента Грюнайзена для решетки, значения которого описывают ударно-волновые данные во всем экспериментально исследованном диапазоне параметров. Холодные кривые в виде (9.25) успешно использовались при построении уравнений состояния широкого класса веществ: металлов, ионных кристаллов, водорода и аргона. Однако формальный характер аппроксимационного разложения (9.25) ограничивает его применение интервалом от  $\sigma_c = 1$  до  $\sigma^*$ , причем уже при сжатии,  $\sigma_c \approx \sigma^*$ , это приводит к нефизичному поведению коэффициента Грюнайзена, а при еще большем сжатии — к прогрессирующему отклонению расчетной кривой  $p_c(V)$  от результатов квантостатистических вычислений (см. подробный анализ данных различных теоретических расчетов в монографии [22]).

Неприменимость аппроксимационного ряда в области сверхвысокого давления привела к дальнейшей модификации вида холодной кривой и методики отыскания ее коэффициентов. Для обеспечения правильных квантостати-

стических асимптотик в области высокой степени сжатия в работе [23] было предложено использовать ряд типа (9.25), но с более низкими степенями, причем старшие члены ( $\sigma_c^{4/3}$  и  $\sigma_c^{5/3}$ ) имеют точное квантостатистическое значение. Младшие члены ряда должны обеспечивать выполнение условий (9.18), (9.19) и адекватное описание холодных кривых в экспериментально исследованном диапазоне параметров. Полученные интерполяционные холодные кривые имеют правильный ход при низком и сверхвысоком давлениях. Однако при использовании формулы (9.25) для расчета коэффициента Грюнайзена решетки они дают для него нереальные значения, не обеспечивающие правильное описание ударно-волновых опытов.

## 9.2. Ангармонизм. Плавление решетки

При увеличении температуры становятся существенными эффекты ангармонизма тепловых колебаний атомов кристаллической решетки и вклад термически возбужденных электронов проводимости. Ангармоничность колебаний приводит в пределе высокой температуры к тому, что поведение решеточной составляющей потенциала конденсированной фазы характеризуется свойствами идеального газа ядер. Данный эффект учитывается в работе [21] введением дополнительного слагаемого в формулу (9.1):

$$F_a(V, T) = \frac{3}{2}RT \ln(1 + z), \quad (9.30)$$

где величина  $z = lRT/c_c^2$  пропорциональна отношению тепловой к упругой части давления,  $l$  — эмпирический коэффициент, определяемый из экспериментов по ударному сжатию пористых образцов. Полагая далее, что между параметрами холодной кривой и коэффициентом Грюнайзена существует связь (9.16), приближение Слэтера–Ландау можно записать в виде

$$\gamma(\rho) = \frac{1}{3} + \frac{d \ln c_c(\rho)'}{2d \ln \rho},$$

выражение для свободной энергии принимает вид

$$F_a(V, T) = \frac{3}{2}RT \ln \frac{\theta^2(V)(1 + z)}{T^2},$$

откуда можно видеть наличие в модели перехода от конденсированного ( $z \approx 0$ ) к идеальноегазовому ( $z \rightarrow \infty$ ) состоянию. В квазиангармонической модели [22] для потенциала конденсированной фазы металлов используется аналогичный подход для учета ангармонизма тепловых колебаний атомов, причем подгоночный параметр  $T_a$  в выражении для свободной энергии,

$$F_a(V, T) = \frac{3}{2}RT \ln \frac{\theta^2(V) + \sigma^{2/3}T/T_a}{T^2},$$

имеет смысл характерной температуры при переходе от свободной энергии кристаллической решетки (9.8) к свободной энергии идеального газа:

$$F_a(V, T) = \frac{3}{2}RT \ln \frac{\sigma^{2/3}}{T}.$$

В серии работ [24–26] идеальноегазовая асимптотика обеспечивалась учетом зависимости теплоемкости от температуры в простейшем аналитическом виде. Примером такой зависимости является предложенное в работе [26] выражение

$$C_V = \frac{3}{2}RT \left( 1 + \frac{1}{1 + 0,1T/T_m} \right), \quad (9.31)$$

полученное на основе данных по простейшим моделям жидкости — системе мягких сфер и кулоновской плазмы. Эффекты ангармонизма были учтены также в рамках ячеечной модели в уравнении состояния [27] со специфическим потенциалом межчастичного взаимодействия,

$$\varphi(R) = \frac{2ma^2\omega^2}{\pi^2} \operatorname{tg}^2 \left( \frac{\pi r}{2a} \right),$$

позволяющим найти точное решение уравнения Шредингера. Данное уравнение состояния обладает правильной асимптотикой для газа при  $T \rightarrow \infty$  и  $V \rightarrow \infty$ , но осуществляет лишь схематическое описание динамических экспериментов при высоком давлении.

Дальнейшее развитие предложенной в работе [21] формы записи свободной энергии со слагаемым (9.30) учета ангармонизма колебаний атомов

выполнено в более общем виде для произвольной зависимости коэффициента Грюнайзена термодинамического потенциала жидкой фазы от плотности [29]. Обобщенное выражение для тепловой компоненты свободной энергии жидкой фазы, имеющей асимптотику идеального газа как в случае высокой температуры, так и малой плотности, приведено в монографии [13]. Имеются также и иные, чисто аппроксимационные, способы учета ангармонизма [30].

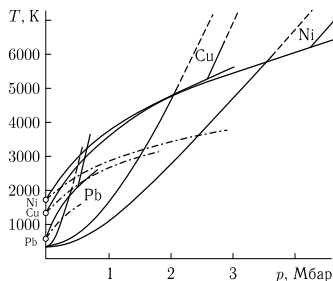


Рис. 9.1. Кривые плавления и температуры ударного сжатия свинца, меди и никеля [28]. Штриховые линии — перегретая твердая фаза, штрих-пунктирные — закон плавления Линдемманна

Расчеты показывают слабое влияние плавления на кинематические характеристики ударной адиабаты, в то время как температура меняется при плавлении более заметно (рис. 9.1). В ранних моделях уравнения состояния эффекты плавления игнорируются и экспериментально наблюдаемые калорические  $p(V, \varepsilon)$  свойства среды описываются этими моделями в пределах погрешности ударно-волновых опытов. Тем не менее обнаружен

ные аномалии именно в кинематической  $D(u)$ -диаграмме для лантанидов [31] объясняются именно плавлением, точнее, его аномальным характером с участком отрицательного знака производной  $dT/dp$ . Прямые измерения температуры ударно-сжатого металла [32] указывают на сильную зависимость этой величины от эффекта плавления. Эти обстоятельства, наряду с необходимостью расчета температуры для решения газодинамических задач с теплопроводностью, требуют корректного учета в уравнении состояния эффекта плавления.

Вклад плавления эффективно включается в уравнение состояния с использованием критерия Линдемманна  $T_m/(\omega_D^2 V_m^{2/3}) = \text{const}$ , значение энтропии плавления полагается при этом усредненным для всех элементов и равным  $\Delta S_m = 1,15R$  [24], а внутренняя энергия жидкой фазы  $\varepsilon_l$  отличается от энергии твердой  $\varepsilon_s$  на тепловую добавку, соответствующую плавлению:

$$\varepsilon_l(V, T) = \varepsilon_s(V, T) + RT_m \left\{ \frac{\Delta S_m}{R} - \frac{3\alpha}{4} + 1,5\tau \left[ \frac{\ln(1 + \alpha\tau)}{\alpha\tau} - 1 \right] \right\}. \quad (9.32)$$

Здесь  $\tau = T/T_m$ ,  $T_m$  — температура плавления при плотности, соответствующей заданным значениям температуры и давления,  $\alpha = 0,1 = \text{const}$ . Выражение (9.32) получается интегрированием теплоемкости  $C_V$  в двухфазной области кристалл-жидкость со скачком энтропии  $\Delta S_m$ . Физическая сущность модели [24] заложена, собственно говоря, в сравнительно простую формулу для теплоемкости:

$$C_{VL} = C_{VS} - 1,5R \frac{\alpha\tau}{\alpha + \tau}. \quad (9.33)$$

В отечественных работах [13, 29] плавление учитывается более последовательно, с явным разделением на жидкость и кристалл [13]. При этом в выражение для потенциала жидкой фазы к решеточному члену добавляется корректирующая функция со свободными параметрами, выбираемыми из условия описания экспериментальных значений скачков плотности и энтропии при плавлении, что обеспечивает правильную теоретическую асимптотику (стирание различий между кристаллом и жидкостью) в пределе высоких значений давления и температуры.

В моделях уравнения состояния Ван дер Ваальса, т. е. имеющих члены термодинамического потенциала с отталкивательной частью и притяжением в области разрежения,  $V_0/V < 1$ , двухфазная область жидкость-пар возникает естественным образом. Примером такого потенциала для жидкости может служить, например, простейшая двухчленная зависимость для упругой энергии [22]:

$$\varepsilon_c(V) = \frac{B_{0c}V_{0c}}{m-n} \left( \frac{\sigma_c^m}{m} - \frac{\sigma_c^n}{n} \right) + \varepsilon_{\text{sub}}, \quad (9.34)$$

где энергия сублимации  $\varepsilon_{\text{sub}} = \varepsilon_c(V \rightarrow \infty)$ . В моделях уравнений состояния металлов применяются и более сложные функциональные зависимости потенциала [13, 33], в том числе в виде ряда (9.25) с 7 коэффициентами [34], а также потенциалы системы твердых или мягких сфер со слабым притяжением [35, 36]. Расширением модели Ван дер Ваальса является модель

«сжимаемого коволюма» с явно задаваемым вкладом притяжения в виде степенной зависимости только от плотности [37].

### 9.3. Термическое возбуждение электронов

Наряду с ангармоничностью колебаний атомов решетки при высокой температуре в уравнении состояния необходимо также учитывать вклад термически возбужденных электронов. Вообще говоря, для каждого вещества этот вклад индивидуален и определяется характером заполнения электронных энергетических зон. Наиболее простым образом вклад электронной подсистемы учитывается в модели почти свободных электронов [3, 4, 38], число которых определяется валентностью элемента и считается постоянным. При не слишком высокой температуре электроны проводимости вырождены и их свойства описываются моделью идеального ферми-газа:

$$\epsilon_e(V, T) = \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \nu(\epsilon_F), \quad (9.35)$$

$$p_e(V, T) = \frac{\gamma_e \epsilon_e}{V}, \quad (9.36)$$

где  $\nu(\epsilon_F)$  — плотность электронных состояний на поверхности Ферми,  $\gamma_e = -d \ln \nu / d \ln V$ , причем для вырожденного электронного газа в модели почти свободных электронов  $\gamma_e = 2/3$ . Модель почти свободных электронов в силу своей некоторой условности не описывает экспериментальные данные о поверхности Ферми, полученные в низкотемпературных экспериментах. Квантовомеханические расчеты  $\nu(\epsilon_F)$  [38] показывают, что для переходных металлов с локализованными в узкой d-зоне электронами проводимости при сжатии происходит уширение и трансформация d-зоны. Очевидно, что при этом плотность электронных состояний сильно меняется, что вызывает аномалии в коэффициенте  $\gamma_e$  и даже его отрицательное значение.

Тонкие эффекты изменения  $\nu(\epsilon_F)$  и, тем более, топологии поверхности Ферми, совершенно игнорируются в полуэмпирических уравнениях состояния, предназначенных для описания термодинамических свойств среды на макроскопическом уровне. Традиционно применяется заведомо упрощенная трактовка вклада электронного компонента, согласно которому значение коэффициента электронной теплоемкости  $\beta_0 \sim \nu(\epsilon_F)$  берется из данных измерений теплоемкости при низкой температуре (где согласно модели Дебая для решетки справедливо  $C_V \sim T^3$ , в то время как для электронной подсистемы  $C_V \sim T$ ), а электронный коэффициент Грюнайзена равен  $1/2$  в соответствии с теорией Томаса–Ферми. В таком допущении вклад в свободную энергию имеет простой вид,

$$F_e(V, T) = \frac{1}{2} \beta_0 T^2 \sigma^{-1/2},$$

широко используемый [3] в полуэмпирических моделях для описания вклада электронов проводимости. Это допущение справедливо при большом сжатии, но сильно ухудшает описание реальной ситуации при нормальных условиях. Для металлов при  $T = 0$  экспериментальные значения  $\gamma_e = 1-3$ , приближение к асимптотическому значению  $1/2$  теории Томаса–Ферми происходит согласно

расчетам для алюминия [39] и тория [40] при температуре порядка  $3 \cdot 10^4$  К. Дальнейшее повышение температуры до  $T \sim \varepsilon_F$  (около  $10^5$  К для металлов) приводит к снятию вырождения и вместо выражений (9.35), (9.36) следует пользоваться точными формулами для идеального электронного газа [41].

В полуэмпирических уравнениях состояния вклад электронной подсистемы обычно осуществляется путем использования аппроксимаций различного типа, в которых, как правило, содержится ряд подгоночных параметров и имеются правильные асимптотики в областях низкой и высокой температуры. Примером такой зависимости является предложенное в работе [21] выражение

$$\varepsilon_e(V, T) = \frac{b^2}{\beta} \ln \operatorname{ch} \left( \frac{\beta T}{b} \right),$$

где  $\beta = \beta_0 \sigma^{-\gamma_e}$ , приводящее при низкой температуре ( $T \ll b/\beta$ ) к формуле для вырожденного электронного газа, а при конечном значении температуры, за счет подгоночного параметра  $b$ , дающее согласие с результатами расчета по модели Томаса–Ферми. Близкая по смыслу аппроксимация

$$\varepsilon_e(V, T) = \frac{\beta T^2}{2} \frac{T_F}{T_F + T \sigma^{-\gamma_e}}$$

используется при описании электронного компонента свободной энергии в конденсированной и газовой фазах [30]. В современных моделях полуэмпирических уравнений состояния также применяются более рафинированные способы учета электронной подсистемы. В модели «сжимаемого коволюма» [37] производится разделение на заряженные и нейтральные частицы, а равновесный состав рассчитывается из условий равенства химических потенциалов компонентов. Для металлов с учетом эффектов притяжения при фиксированной степени ионизации  $\alpha = 4$  отмечается некоторое «смягчение» (при практической неизменном описании адиабаты кристаллического металла) ударных адиабат пористых свинца и никеля [37].

Полуэмпирическое уравнение состояния железа [42] имеет для описания электронной подсистемы гладко сшитые результаты расчетов по самосогласованной ячеечной модели [43] и плазменной модели ионизационного равновесия [44]. Модель QEOS [45] и ее дальнейшее развитие с большим числом подгоночных параметров в жидкой фазе [46] используют для этой цели результаты расчета по автомодельной теории Томаса–Ферми. Понимая ограниченную область применимости квазиклассического описания, авторы работы [45] проводят последующую феноменологическую коррекцию свободной энергии (и соответственно ее производных — давления, энтропии и т. п.) с помощью подгоночной функции  $f(T)$ , так что  $F_e^* = f(T)F_e$ . В плазменной модели «среднего иона» [47] вклад электронного компонента в давление полагается равным давлению идеального ферми-газа свободных электронов, концентрация которых определяется из уравнения ионизационного равновесия, расширенного с целью описания ионизации холодного сжатого вещества.

При построении уравнений состояния диэлектриков, например, ионных кристаллов [49] или инертных газов [50], необходимо принять во внимание

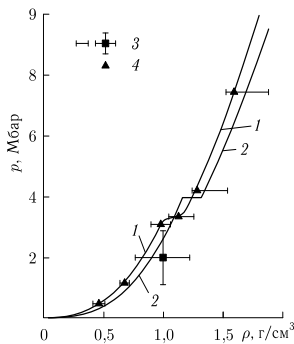


Рис. 9.2. Нулевые изотермы (1) и изэнтропы (2) молекулярного и металлического водорода [48] 3 — экспериментальные данные, 4 — газодинамический расчет

происходящее при разогреве термическое возбуждение электронов в зону проводимости. В этом случае число свободных электронов зависит от плотности и температуры  $N_e \sim T^{3/2} \exp(-\Delta E/2kT)$ , где  $\Delta E(V)$  — энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости, которая либо задается модельным образом [49, 51], либо вычисляется прямыми квантово-механическими методами ([52–54], гл. 3). В свободной энергии помимо члена, ответственного за вклад свободных электронов, необходимо добавить также выражение, учитывающее термическое возбуждение электронов [49–51, 55, 56] (рис. 9.2). Поскольку ширина щели со сжатием уменьшается, то дополнительный член вносит в давление отрицательную добавку, значение которой сильно зависит от скорости схлопывания щели [57].

#### 9.4. Испарение. Широкодиапазонные УРС

Описание процессов, протекающих в условиях высокотемпературного расширения вещества, привело к необходимости построения широкодиапазонных полуэмпирических моделей, последовательно учитывающих эффекты испарения. Одним из способов описания [58, 59] перехода системы из конденсированного состояния в газовое является шивка квазигармонической модели [60] с модифицированной моделью жидкого состояния Ван-дер-Ваальса [61, 62], что является чисто подгоночной процедурой и не обеспечивает правильного количественного согласования. В то же время наличие экспериментальных данных по изэнтропическому расширению ударно-сжатых металлов [63, 64] дает необходимую информацию для разработки полуэмпирических уравнений состояния, количественно верно описывающих переход жидкость–пар (плазма).

Проведение сквозных газодинамических расчетов в широком интервале изменения физических условий потребовало создания широкодиапазонных уравнений состояния, осуществляющих адекватное, термодинамически полное описание свойств вещества в обширной области фазовой диаграммы с согласованным учетом эффектов плавления, испарения, диссоциации, ионизации и т. п. При этом расширение области применимости полуэмпирических уравнений состояния с явным выделением в них физических асимптотик привело к заметному усложнению слагаемых термодинамического потенциала в (9.1) и увеличению числа свободных параметров, связанному с необходимостью описания соответствующих предельных ситуаций. На основе различных принципов построения были получены широкодиапазонные уравнения состо-

яния многих веществ — металлов [63, 65–71], воды [72–76], поваренной соли [72, 77].

Пример согласованного описания в рамках единого уравнения состояния [63] разнородных экспериментальных данных для Рb — ударных адиабат, скорости звука при ударном нагружении, температуры в волне разгрузки, приведен на рис. 9.3. Адекватность расчета [63] экспериментальным результатам иллюстрирует также рис. 9.4, на котором нанесены расчетные и опытные данные по термодинамическим свойствам алюминия в околкритической области и в жидкой фазе. Полуэмпирические уравнения состояния адиабатически расширенной плазмы урана приведены на рис. 9.5.

Соответствующие термодинамические поверхности, построенные по широкодиапазонным полуэмпирическим уравнениям, предназначенные для урана [79] и цинка, приведены на рис. 9.6, 9.7. В качестве исходных здесь исполь-

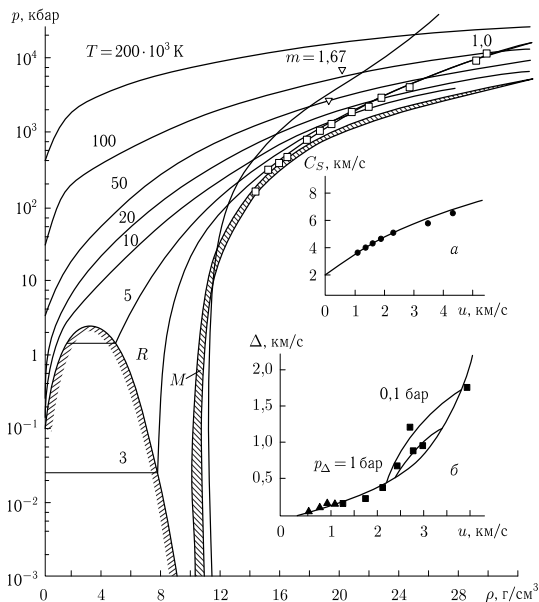


Рис. 9.3. Фазовая диаграмма свинца [63]. Значки — эксперимент;  $M$  — область плавления,  $R$  — кривая кипения,  $m$  — ударные адиабаты (штриховые линии — расчет по модели Томаса–Ферми),  $T$  — изотермы. Вставки:  $a$  — скорость звука на ударной адиабате,  $b$  —  $\Delta = W - 2u$  в изэнтропической волне разгрузки

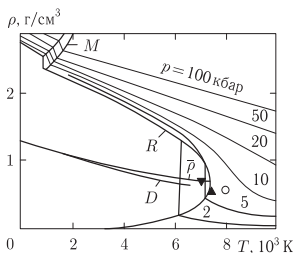
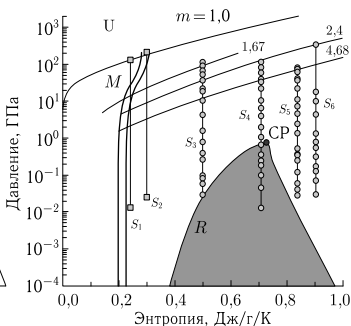
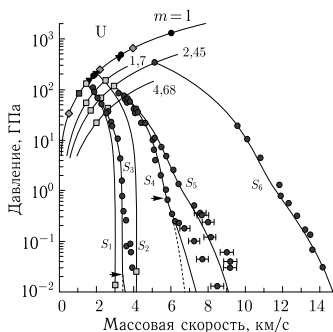


Рис. 9.4. Уравнение состояния алюминия в околокритической области [63].  $M$  — область плавления,  $R$  — кривая кипения,  $D$  — прямолинейный диаметр,  $\bar{\rho}$  — полусумма плотностей жидкой и газовой фазы. Значки — оценки параметров критической точки на основе принципов термодинамического подобия [78]



- ▼ — Избель; ◆ — Скидмор и Моррис; ■ — Жерноклетов,  $s = c$ ;  
 □ — Жерноклетов, ударное сжатие; ● — Фунтиков,  $s = c$ ; ● — Фунтиков, ударное сжатие

Рис. 9.5. Адиабатическое расширение ударно-сжатой плазмы урана [79]

зован широкий спектр статистических и динамических экспериментальных данных, список которых представлен в табл. 9.1.

При высоких давлениях и/или температурах данные уравнения состояния имеют асимптотику к моделям сжатого вещества Томаса–Ферми (гл. 6) и к плазменной модели Дебая–Хюккеля (гл. 4).

Пример практического приложения широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния приведен на рис. 9.8, где представлена энтропийная диаграмма состояний (построенная по полуэмпирическому УРС [13]), которая дает возможность определить физические условия, возникающие при воздействии мощных потоков релятивистских тяжелых ионов на вещество (в проекте FAIR [80]).

Из (рис. 9.3, 9.4) приведенных графиков видно точное, в пределах погрешности эксперимента, соответствие расчетных характеристик результатам экспериментальных измерений в широком интервале изменения термодина-

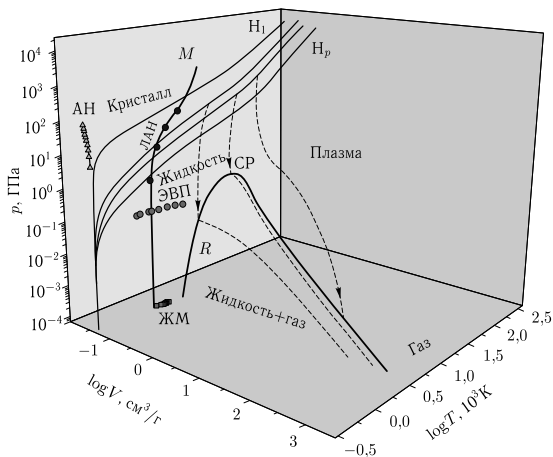


Рис. 9.6. Полуэмпирическое уравнение состояния урана [79]

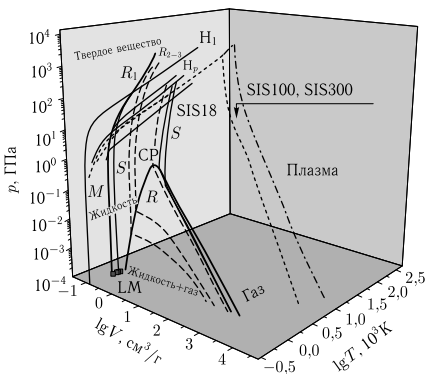


Рис. 9.7. Энергетическая поверхность состояний цинка, доступных генераторам тяжелых ионов [80–83]

мических параметров — от нормальных условий до давлений в сотни мегабар. Одновременно с адекватным описанием совокупности экспериментальных данных, в том числе полученных в условиях плавления и испарения,

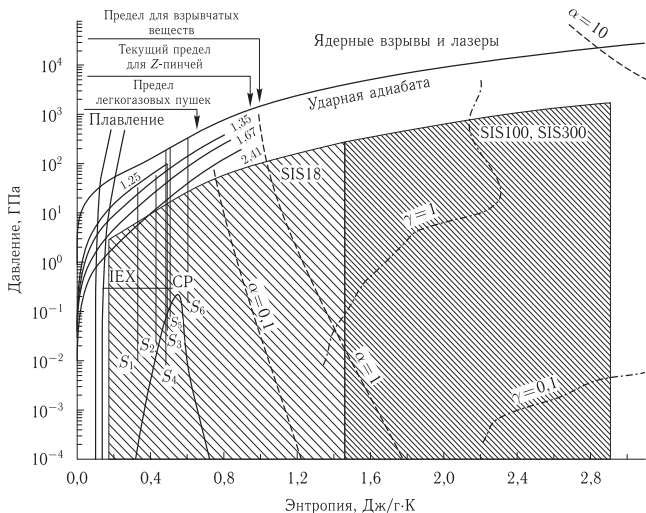


Рис. 9.8. Возможности ускорителей тяжелых ионов, SIS18, SIS100, SIS300, для генерации высоких плотностей энергии в свинце [80–83]

Таблица 9.1. Исходные данные для построения полуэмпирических уравнений состояния

Статические эксперименты
– изотермы $T = 293 \text{ K}$
– давление на кривой плавления
– скачки объемов и энтальпии при плавлении
– температура кипения при $p = 1 \text{ атм}$
– энергия связи
– электронная теплоемкость
Динамические эксперименты
– ударные адиабаты сплошных образцов
– ударные адиабаты пористых образцов
– адиабаты разгрузки
– данные электровзрывов
– температура ударного сжатия
– скорость звука в ударно-сжатом состоянии
Теоретические асимптотики
– теория Томаса–Ферми
– ионизационная модель плазмы
– электронный спектр при низких температурах

широкодиапазонные уравнения состояния алюминия [66] учитывают также эффекты ионизации и имеют правильные асимптотики в пределе высоких температур и больших объемов. Необходимо подчеркнуть, что в настоящее время полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния являются наиболее приемлемым прагматическим способом согласованного и точного описания термодинамики веществ в широкой области фазовой диаграммы, обобщающим результаты экспериментов и модельных расчетов.

Конкретные методики и результаты построения широкодиапазонных уравнений состояния для ряда конструкционных материалов содержатся в работах [1, 33, 36, 51, 55, 56, 68, 70, 71, 84].

Полезные сведения по термодинамике элементов и соединений вместе с параметрами полуэмпирических уравнений состояния читатель найдет в работе [69], а также в электронной базе данных [www.ihed.ras.ru/rusbank](http://www.ihed.ras.ru/rusbank).

### 9.5. Задача Ферми–Зельдовича. Построение термодинамически полного УРС по результатам динамических измерений

Специфическая особенность динамических экспериментов, на основании которых строятся полуэмпирические модели УРС, состоит в том, что опытные данные позволяют получить уравнение состояния вещества только в термодинамически неполном виде  $E = E(p, V)$ , так как внутренняя энергия не является полным термодинамическим потенциалом по отношению к переменным  $p$  и  $V$ , и поэтому для построения замкнутой термодинамики необходима дополнительная информация о температуре  $T = T(p, V)$  [2] или энтропии  $S = S(p, V)$ , которая крайне существенна для разработки адекватных полуэмпирических уравнений состояния.

Дело в том, что динамические методы исследования [2] основаны на фиксации механических параметров гидродинамического движения, которые не дают информации о термических, либо энтропийных характеристиках ударно-сжатого вещества.

При распространении по веществу стационарного ударного разрыва на его фронте выполняются законы сохранения массы, импульса и энергии [2], которые связывают кинематические параметры — скорость ударной волны  $D$  и массовую скорость вещества за ее фронтом  $u$  с термодинамическими величинами — удельной внутренней энергией  $E$ , давлением  $p$  и удельным объемом  $V$ :

$$\begin{aligned} V/V_0 &= (D - u)/D, & p &= p_0 + Du/V_0, \\ E &= E_0 + (1/2)(p + p_0)(V_0 - V), \end{aligned} \quad (9.37)$$

где индексом 0 отмечены параметры покоящегося вещества перед фронтом ударной волны. Эти уравнения позволяют по регистрации любых двух из пяти параметров  $E$ ,  $p$ ,  $V$ ,  $D$ ,  $u$ , характеризующих ударный разрыв, найти гидро- и термодинамические характеристики вещества. Наиболее легко и точно базисными методами измеряется скорость ударной волны  $D$ . Выбор второго измеряемого параметра зависит от конкретных условий эксперимента.

Анализ погрешностей соотношений в (9.37) показывает [85, 86], что в случае сильносжимаемых («газовых») сред целесообразно осуществлять

регистрацию концентрации  $p = V^{-1}$  ударно-сжатого вещества. В настоящее время разработана методика таких измерений, основанная на фиксации поглощения плазмой цезия, аргона и воздуха «мягкого» рентгеновского излучения. При меньшей сжимаемости системы (конденсированные среды) приемлемые точности обеспечиваются [3, 87] путем регистрации массовой скорости движения  $u$ . Таким образом, исследовались состояния вырожденной плазмы металлов [88–91] и плотной бoльцмановской плазмы аргона и ксенона.

В экспериментах по фиксации кривых изоэнтропического расширения ударно-сжатого вещества [90, 91] состояния в центрированной волне разгрузки описываются интегралами Римана [2]:

$$V = V_H + \int_p^{p_H} \left( \frac{du}{dp} \right)^2 dp, \quad E = E_H - \int_p^{p_H} p \left( \frac{du}{dp} \right)^2 dp, \quad (9.38)$$

которые вычисляются вдоль измеренной изоэнтропы  $p_s = p_s(u)$ . Проводя регистрации при различных начальных условиях и интенсивностях ударных волн, можно определить калорическое уравнение состояния  $E = E(p, V)$  в области  $p$ - $V$ -диаграммы, перекрытой адиабатами Гюгонио или (и) Пуассона. В выполненных к настоящему времени экспериментах по динамическому воздействию на плазму изменение интенсивности ударных волн осуществлялось варьированием мощности источников возбуждения — давления толкающего газа, типов ВВ, метательных устройств и мишеней. Кроме того, использовались разнообразные способы изменения параметров исходных состояний: изменение начальных температур и давлений (плазма инертных газов, цезия, жидкости), применение мелкодисперсных мишеней в целях увеличения эффектов необратимости [2, 90, 91].

Таким образом, динамические методы диагностики, основываясь на общих законах сохранения, позволяют свести задачу определения калорического уравнения состояния  $E = E(p, V)$  к измерению кинематических параметров движения ударных волн и контактных поверхностей, т.е. к регистрации расстояний и времен, что может быть выполнено с высокой точностью. Как мы отмечали, внутренняя энергия, однако, не является термодинамическим потенциалом по отношению к переменным  $p$ ,  $V$ , и для построения замкнутой термодинамики системы необходима дополнительная зависимость температуры  $T(p, V)$ .

В оптически прозрачных и изотропных средах (газы, ионные кристаллы и т.п.) температура измеряется совместно с другими параметрами ударного сжатия. Конденсированные среды, и в первую очередь металлы, как правило, непрозрачны, так что световое излучение ударно-сжатой среды недоступно для регистрации.

В соответствии с предложением Э. Ферми [92] и Я.Б. Зельдовича [93] термодинамически полное уравнение состояния может быть построено непосредственно по результатам динамических измерений без введения априорных соображений о свойствах и характере исследуемого вещества [90, 91], исходя из первого закона термодинамики и известной из эксперимента зависимости  $E = E(p, V)$  (или более удобной функции  $\gamma(p, V) = pV/E(p, V)$ ). Это приво-

дит к линейному неоднородному дифференциальному уравнению для  $T(p, V)$ :

$$\left[ p + \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_p \right] \frac{\partial T}{\partial p} - \left( \frac{\partial E}{\partial p} \right)_V \frac{\partial T}{\partial V} = T, \quad (9.39)$$

решение которого строится методом характеристик:

$$\frac{\partial p}{\partial V} = \frac{p + \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_p}{\left( \frac{\partial E}{\partial p} \right)_V}; \quad \frac{\partial T}{\partial V} = - \frac{T}{\left( \frac{\partial E}{\partial p} \right)_V} \quad (9.40)$$

или

$$E = E_0 \exp \left\{ - \int_{V_0}^V \gamma(V, E) d \ln V \right\}, \quad (9.41)$$

$$T = T_0 \frac{pV}{p_0 V_0} \exp \left\{ - \int_{V_0}^V \left( \frac{\partial \ln \gamma(E, V)}{\partial \ln V} \right) d \ln V \right\}.$$

Уравнения (9.39)–(9.41) дополняются начальными условиями: температура задается в области малых плотностей, где возможен ее надежный теоретический расчет (цезиевая плазма), либо она известна из статического эксперимента [90, 91].

Необходимые для расчета правых частей (9.40), (9.41) зависимости  $E(p, V)$  определялись по экспериментальным данным в форме степенных полиномов:

$$E(p, V) + \sum_i \sum_j a_{ij} p^i N^j,$$

а для  $\gamma(E, V)$  в виде дробно-рациональных функций.

Определение точности полученного решения в зависимости от экспериментальных погрешностей и погрешностей в начальных данных осуществлялось методом Монте–Карло путем численного моделирования вероятностной структуры процесса измерения [90, 91].

Данный метод носит общий характер, так как свободен от ограничивающих предположений о свойствах, характере и фазовом составе исследуемой среды, так как использует первые принципы механики сплошной среды — законы сохранения (9.37), (9.38) и основное термодинамическое тождество (9.39). Эта термодинамическая универсальность дала возможность построить по единой методике уравнения состояния широкого спектра конденсированных сред, а также применить его

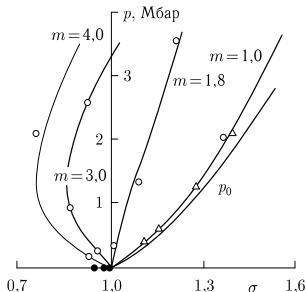


Рис. 9.9. Ударные адиабаты ( $m$ ) и холодная кривая ( $p_0$ ) вольфрама [94]

для описания фазовых превращений [90, 91]. Особенно эффективным методом оказался для изучения термодинамики неидеальной плазмы цезия на основе экспериментов по ударному и адиабатическому сжатию насыщенных паров металлов основной и переходной групп, ионных кристаллов, окиси кремния; результаты расчета такого рода для вольфрама иллюстрирует рис. 9.9.

### Список литературы

1. Широкодиапазонные уравнения состояния конструкционных материалов / *Валько В. В., Ломоносов И. В., Острик А. В. и др.* // Физика ядерного взрыва. В 5 т. Том 2. Действие взрыва. — М.: Изд-во физико-математической литературы, 2010. — С. 140.
2. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.
3. *Альтшулер Л. В.* Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. — 1965. — Т. 85, № 2. — С. 197.
4. *Жарков В. Н., Калинин В. А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. — М.: Наука, 1968.
5. *Prieto F. E.* A law of corresponding states for materials at shock pressures // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1974. — V. 35, No. 2. — P. 279.
6. *Prieto F. E.* System-independent release adiabats from shocked states\* // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1975. — V. 36, No. 9. — P. 871.
7. *Prieto F. E., Renero C.* The equation of state of solids // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1976. — V. 37, No. 2. — P. 151.
8. *Prieto F. E., Renero C.* Test of a high pressure equation of state // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1982. — V. 43, No. 2. — P. 147.
9. *Чекин Б. С.* // ПМТФ. — 1978. — № 2. — С. 89.
10. *Анисичкин В. Ф.* // ПМТФ. — 1978. — № 3. — С. 117.
11. The equation of state of solids from shock wave studies / *McQueen R. G., Marsh S. P., Taylor J. W. et al.* // High Velocity Impact Phenomena / Ed. by R. Kinslow. — N.Y.: Academic Press, 1970. — P. 293.
12. *Boehler R., Ramakrishnan J.* Ramakrishnan J. Experimental results on the pressure dependence of the Grüneisen parameter // J. Geophys. Res. Ser. B. — 1980. — V. 85. — P. 6996.
13. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. / *Бушман А. В., Канель Г. И., Ни А. Л., Фортвов В. Е.* — Черноголовка: ИХФ АН СССР, 1989.
14. Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кальдиरोлы, Г. Кнопфеля. — М.: Мир, 1974.
15. *Romain J., Migault A., Jacquesson J.* Relation between the Grüneisen ratio and the pressure dependence of Poisson's ratio for metals // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1976. — V. 37, No. 12. — P. 1159.
16. *Romain J. P., Migault A., Jacquesson J.* Melting curve and Grüneisen coefficient for aluminum // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1980. — V. 41, No. 4. — P. 323.
17. *Neal T.* Dynamic determinations of the Grüneisen coefficient in aluminum and aluminum alloys for densities up to  $6 \text{ mg/m}^3$  // Phys. Rev. B. — 1976. — V. 14, No. 12. — P. 5172.
18. *Delannoy M., Perrin G.* On the determination of the volume dependence of Grüneisen parameters in cubic and non-cubic solids // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1980. — V. 41, No. 1. — P. 11.

19. Кормер С. Б., Урлин В. Д., Попова Л. Т. Интерполяционное уравнение состояния и его приложение к описанию экспериментальных данных по ударному сжатию металлов // ФТТ. — 1961. — Т. 3. — С. 2131.
20. Куропатенко В. Ф., Минаева И. С. Уравнения состояния некоторых металлов // Численные методы мех. сплошной среды. — 1982. — Т. 13, No. 6. — С. 69.
21. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах / Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42. — С. 686.
22. Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортвов В. Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. — Черноголовка: ИХФЧ РАН, 1992.
23. Калиткин Н. Н., Говорухина И. А. Интерполяционные формулы холодного сжатия веществ // ФТТ. — 1965. — Т. 7. — С. 355.
24. Grover R. Liquid metal equation of state based on scaling // J. Chem. Phys. — 1971. — V. 55. — P. 3435.
25. Grover R. High temperature equation of state for simple metals // Proceedings of the Seventh Symposium on Thermophysical Properties / Ed. by A. Cezairliyan. — N.Y.: ASME, 1977.
26. Grover R. High Pressure Science and Technology / Ed. by K. D. Timmerhaus, M. S. Barber. — N.Y.: Plenum Press, 1979. — V. 1.
27. Naumann R. Equation of state for porous metals under strong shock compression // J. Appl. Phys. — 1971. — V. 42. — P. 4945.
28. Урлин В. Д., Иванов А. А. // ДАН СССР. — 1963. — Т. 149. — С. 1303.
29. Урлин В. Плавление при сверхвысоких давлениях, полученных в ударной волне // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 49. — С. 485.
30. Сапожников А. Т., Першина А. В. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // ВАНТ, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. — 1979. — Т. 3, № 4(6). — С. 47.
31. Hugoniot equation of state of the lanthanides / Carter W. J., Fritz J. N., Marsh S. P., McQueen R. G. // J. Phys. Chem. Solids. — 1975. — V. 36. — P. 741.
32. Shock temperatures and melting of iron at Earth core conditions / Yoo C. S., Holmes N. C., Ross M. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1993. — V. 70, No. 25. — P. 3931.
33. Хищенко К. В., Фортвов В. Е. К вопросу об уравнении состояния алюминия в области отрицательных давлений // Физика экстремальных состояний вещества — 2002 / Под ред. Фортвов В. Е. а, В. П. Ефремова, К. В. Хищенко и др. — Черноголовка: ИПХФ РАН, 2002. — С. 68.
34. Воробьев В. С. Исследование равновесия жидкость-пар с помощью интерполяционного уравнения состояния // ТВТ. — 1995. — Т. 33, № 4. — С. 557.
35. Young D. A., Alder B. J. Critical Point of Metals from the van der Waals Model // Phys. Rev. A. — 1971. — V. 3, No. 1. — P. 364.
36. Analysis of isobaric expansion data based on soft-sphere equation of state for liquid metals / Levashov P. R., Fortov V. E., Khishchenko K. V., Lomonosov I. V. // Shock Compression of Condensed Matter — 2001 / Ed. by M. D. Furnish, N. N. Thadhani, Y. Horie. — Melville, NY: AIP, 2002. — P. 71.
37. Медведев А. Б. Модель уравнения состояния с учетом испарения // ВАНТ, сер. Теоретическая и прикладная физика. — 1992. — Т. 26, № 1. — С. 23.
38. Воропинов А. И., Гандельман Г. М., Подвальный В. Г. Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // УФН. — 1970. — Т. 100. — С. 193.

39. *Godwal B. K., Sikka S. K., Chidambaram R.* Electronic Grüneisen parameter in the shock Hugoniot equation of state of aluminum // *Phys. Rev. B.* — 1979. — V. 20, No. 6. — P. 2362.
40. *Godwall B. K.* Electronic thermal Grüneisen parameters for elements with high atomic numbers // *J. Phys. F: Met. Phys.* — 1980. — V. 10. — P. 377.
41. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 5, 9. Статистическая физика. В 2-х ч. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
42. *Kerley G.* Multiphase equation of state for iron // Report SAND93-0027. — Albuquerque: Sandia Natl. Labs. — 1993.
43. *Liberman D.* // Report LA-UR-77-15950. — Los Alamos National Laboratory. — 1979.
44. *Kerley G.* User's manual for Panda II: a computer code for calculating equations of state // Report SAND88-2291. — Albuquerque: Sandia Natl. Labs. — 1991.
45. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter / *More R., Warren K., Young D., Zimmerman G.* // *Fluids.* — 1988. — V. 31, No. 10. — P. 3059.
46. *Young D., Corey E. M. A.* A new global equation of state model for hot dense matter. // Preprint UCRL-JC-120095. — Livermore: Lawrence Livermore Lab. — 1995.
47. *Баско М. М.* Уравнение состояния металлов в приближении среднего иона // *ТВТ.* — 1985. — Т. 23, № 5. — С. 483.
48. *Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Михайлова О. Л. и др.* // *ЖЭТФ.* — 1978. — Т. 75. — С. 1683.
49. *Кормер С. В., Синицын М. В., Кириллов Г. А., Урлин В. Д.* // *ЖЭТФ.* — 1965. — Т. 48. — С. 1033.
50. *Ross M.* Shock Compression of Argon and Xenon. IV. Conversion of Xenon to a Metal-Like State // *Phys. Rev.* — 1968. — V. 171, No. 3. — P. 777.
51. Термодинамические свойства пластиков в широком диапазоне плотностей и температур / *Хищенко К. В., Ломоносов И. В., Фортвов В. Е., Шленский О. Ф.* // *ДАН.* — 1996. — Т. 349, № 3. — С. 322.
52. *McMahan A. K., Ross M.* High-temperature electron-band calculations // *Phys. Rev. B.* — 1977. — V. 15, No. 2. — P. 718.
53. *McMahan A. K., Hord B. L., Ross M.* Experimental and theoretical study of metallic iodine // *Phys. Rev. B.* — 1977. — V. 15, No. 2. — P. 726.
54. *McMahan A. K.* Calculation of the electronic transition in cesium // *Phys. Rev. B.* — 1978. — V. 17, No. 4. — P. 1521.
55. *Хищенко К. В.* Температура и теплоемкость полиметилметакрилата за фронтом сильных ударных волн // *ТВТ.* — 1997. — Т. 35, № 6. — С. 1002.
56. *Khishchenko K. V., Lomonosov I. V., Fortov V. E.* Equations of state for polymethylmethacrylate and polytetrafluoroethylene in a wide range of densities and temperatures // *High Temp.-High Press.* — 1998. — V. 30, No. 3. — P. 373.
57. *Ross M., McMahan A. K.* Condensed xenon at high pressure // *Phys. Rev. B.* — 1980. — V. 21, No. 4. — P. 1658.
58. *Young D. A.* // Report UCRL-51575. — Livermore: Univ. of California, 1974.
59. *Boissiere C., Fiorese G.* // *Rev. Phys. Appl.* — 1977. — V. 12. — P. 857.
60. *Grover R.* Liquid Metal Equation of State Based on Scaling // *J. Chem. Phys.* — 1971. — V. 55, No. 7. — P. 3435.
61. *Hoover W. G., Ross M.* // *Contemp. Phys.* — 1971. — V. 12. — P. 339.
62. Generalized van der Waals equation of state / *Hoover W. G., Stell G., Goldmark E., Degani G. D.* // *J. Chem. Phys.* — 1975. — V. 63, No. 12. — P. 5434.

63. Альтшулер Л. В., Бушман А. В., Жерноклетов М. В. и др. // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 78. — С. 741.
64. Альтшулер Л. В., Баканова А. А., Бушман А. В. и др. // ЖЭТФ. — 1977. — Т. 73. — С. 1866.
65. Сапожников А. Т., Першина А. В. // Вопросы ат. науки и техники. Сер. Методика и программы решения задач математической физики. — 1979. — Т. 3. — С. 37.
66. Бушман А. В., Л. Н. А., Фортвов В. Е. // Уравнение состояния в экстремальных условиях / Под ред. Г. В. Гадияка. — ИТПМ СО АН СССР, 1981. — С. 3.
67. Бушман А. В., Фортвов В. Е., Шарипджанов И. И. // ТВТ. — 1977. — Т. 15. — С. 1095.
68. Wide-range multi-phase equations of state for metals / Fortov V. E., Khishchenko K. V., Levashov P. R., Lomonosov I. V. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. — 1998. — V. 415, No. 3. — P. 604.
69. Lomonosov I. V. Multi-phase equation of state for aluminum // Laser Part. Beams. — 2007. — V. 25, No. 4. — P. 567.
70. Khishchenko K. V. Equation of state and phase diagram of tin at high pressures // J. Phys. Conf. Ser. — 2008. — V. 121. — P. 022025.
71. Fortov V. E., Lomonosov I. V. Shock waves and equations of state of matter // Shock Waves. — 2010. — V. 20, No. 1. — P. 53.
72. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Шарипджанов И. И. // Препринт ИПМ АН СССР № 43. — 1976.
73. Бобровский С. В., Гоголев В. М., Менжулин М. Г., Шилова Р. П. // ПМТФ. — 1978. — № 5. — С. 130.
74. Коваленко Г. В., Сапожников А. Т. // Вопросы ат. науки и техники. Сер. Методика и программы решения задач математической физики. — 1979. — Т. 3. — С. 93.
75. Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Метод построения // ТВТ. — 2008. — Т. 46, № 2. — С. 206.
76. Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Результаты расчетов // ТВТ. — 2008. — Т. 46, № 3. — С. 362.
77. Бобровский С. В., Гоголев В. М., Замышляев В. В., Ложкина В. П. // ПМТФ. — 1979. — № 6. — С. 112.
78. Ohse R. W., Tippelskirch H. // High Temp.—High Press. — 1977. — V. 9. — P. 376.
79. Фортвов В. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества. — М.: Букос, 2005.
80. Фортвов В. Е., Хоффманн Д., Шарков Б. Ю. Интенсивные ионные пучки для генерации экстремальных состояний вещества // УФН. — 2008. — Т. 178, № 2. — С. 113.
81. Unique Capabilities of an Intense Heavy Ion Beam as a Tool for Equation-of-State Studies / Hoffmann D. H. N., Fortov V. E., Lomonosov I. V. et al. // Phys. Plasmas. — 2002. — V. 9, No. 9. — P. 3651.
82. Studies of Strongly Coupled Plasmas Using Intense Heavy Ion Beams at the Future FAIR Facility: the HEDgeNOB Collaboration / Tahir N. A., Deutsch C., Fortov V. E. et al. // Contributions to Plasma Physics. — 2005. — V. 45, No. 3–4. — P. 229.
83. Proposal for the Study of Thermophysical Properties of High-Energy-Density Matter Using Current and Future Heavy-Ion Accelerator Facilities at GSI Darmstadt / Tahir N. A., Deutsch C., Fortov V. E. et al. // Phys. Rev. Lett. — 2005. — V. 95, No. 3. — P. 035001.
84. Хищенко К. В. Уравнение состояния магния в области высоких давлений // Письма в ЖТФ. — 2004. — Т. 30, № 19. — С. 65.

85. Emission properties and structural ordering of strongly coupled dust particles in a thermal plasma / *Fortov V. E., Nefedov A. P., Petrov O. F. et al.* // *Phys. Lett. A.* — 1996. — V. 219, No. 1–2. — P. 89.
86. *Нефедов А. П., Петров О. Ф., Фортвов В. Е.* Кристаллические структуры в плазме с сильным взаимодействием макрочастиц // *УФН.* — 1997. — Т. 167, № 11. — С. 1215.
87. Развитие в России динамических методов исследований высоких давлений / *Альтшулер Л. В., Трунин Р. Ф., Урлин В. Д. и др.* // *УФН.* — 1999. — Т. 169, № 3. — С. 323.
88. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
89. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // *УФН.* — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
90. *Fortov V., Yakubov I., Khrapak A.* Physics of Strongly Coupled Plasma. — Oxford: Clarendon Press, 2006.
91. *Фортвов В., Храпак А., Якубов И.* Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
92. *Fermi E.* // *Rend. Accad. Nazl. Lincei.* — 1927. — V. 6. — P. 602.
93. *Зельдович Я. Б.* // *ЖЭТФ.* — 1957. — Т. 32. — С. 1577.
94. *Фортвов В. Е.* // *ПМТФ.* — 1972. — С. 156.

## РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ПЛАЗМА. ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ ОПИСАНИЕ

В этой главе, следуя работе [1], мы рассмотрим термодинамическое описание электромагнитной (кулоновской) плазмы, возникающей в различных астрофизических объектах — белых, коричневых и желтых карликах, красных гигантах, нейтронных и кварк-глюонных звездах.

Эволюционируя под действием двух «движущих» сил — гравитационного сжатия и термоядерного энерговыделения — вещество в звездных объектах проходит чрезвычайно широкий спектр термодинамических состояний: от разреженного межгалактического газа,  $n_e \approx 10^{-31} \text{ см}^{-3}$ ,  $T \approx 10^3 \text{ К}$ , до сверхсжатого нейтронного вещества и кварк-глюонной плазмы в ядрах нейтронных и «странных» звезд,  $\rho \approx 10^{14} - 10^{17} \text{ г/см}^3$ ,  $T \approx 10^8 - 10^{11} \text{ К}$ . И если в нижнем диапазоне этих параметров состояния речь идет о применимости условий термодинамического равновесия, то в верхнем диапазоне сверхсжатий необходимо содержательно описывать релятивистские эффекты, вырождение электронов и ионов, термическую ионизацию и ионизацию давлением, термодинамические эффекты излучения, а также сложные трансформации ядерной компоненты вещества.

Построение адекватных термодинамических моделей (для описания этого спектра состояний) явилось серьезным вызовом современной физике, так как потребовало привлечения самых последних сведений из ядерной физики и физики высоких энергий [2, 3]. Естественно, что в отличие от предыдущей главы, где мы имели возможность в определенной мере опираться на эксперимент, здесь наши экспериментальные возможности более чем ограничены и сводятся к наблюдательным данным об удаленных от нас на многие парсеки астрофизических объектах да релятивистскому столкновению тяжелых ионов в земных ускорителях. Увы, эксперимент не может здесь быть надежной поддержкой.

Дальнейшее изложение мы построим в соответствии с замечательной книгой [1], где основное внимание уделено уравнениям состояния нейтронных звезд — конечной стадии эволюции звезд с массой  $M \gtrsim 8M_\odot$ , образующихся в результате мощного взрыва сверхновых после выгорания в них термоядерного топлива. Это наиболее интересные и «экстремальные» астрофизические объекты с рекордно высокими значениями плотности, давления, температуры и магнитной индукции, достигающими, соответственно, до  $\rho \approx 10^{15} \text{ г/см}^3$ ,  $p \approx 10^{34} \text{ дин/см}^2$ ,  $T \approx 10^{11} \text{ К}$ ,  $B \approx 10^{15} \text{ Гс}$ , которые мы будем считать предельными в дальнейшем изложении [1].

Рассмотрим электромагнитную плазму с кулоновским взаимодействием между частицами с зарядами  $Z$  и массовым числом  $A_j$ . Плотность частиц в такой плазме  $n_N = \sum n_j$ . Условие электронейтральности имеет вид

$n_e = \langle Z \rangle n_j$ , где скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по компонентам  $j$  со статвесом, пропорциональным  $n_j$ :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{n_N} \sum_j n_j f_j. \quad (10.1)$$

Имея ввиду ядерные трансформации и возможность перехода нуклонов из связанных в ядрах в свободные состояния, для концентрации барионов можно записать  $n_b \approx A' n_N = [\langle A \rangle + A''] n_N$ ; здесь  $\langle A \rangle$  — средняя концентрация связанных в ядрах барионов,  $A''$  — концентрация свободных нейтронов на одно ядро. Получается, что  $A'' n_N = n_n (1 - \omega)$ , где  $n_n$  — концентрация свободных нейтронов, а  $\omega$  — часть объема, занятого атомными ядрами.

Массовая плотность в релятивистском случае выражается через полуценную плотность энергии  $\rho = \varepsilon/c^2$ , которая в классическом случае имеет привычный вид,  $\rho \approx m_n n_b$ .

### 10.1. Описание электронов

Для описания релятивизма свободных электронов применяется параметр Солпитера [4]:

$$x_r = \frac{p_F}{m_e c} \sim 1,00884 \left( \frac{\rho_6 \langle Z \rangle}{A'} \right)^{1/3}, \quad (10.2)$$

где  $\rho_6 = \rho/10^6$  г/см<sup>3</sup>,

$$p_F = \hbar k_F = \hbar (3\pi^2 n_e)^{1/3}; \quad (10.3)$$

$$\varepsilon_F = c \sqrt{(m_e c)^2 + p_F^2}. \quad (10.4)$$

Обычно энергию покоя  $m_e c^2$  включают в энергию электронов. Характерная температура Ферми имеет вид

$$T_F = T_r (\gamma_r - 1), \quad (10.5)$$

где

$$T_r = \frac{m_e c^2}{k_B} \approx 5,930 \cdot 10^9 \text{ К} \quad (10.6)$$

— характерная релятивистская температура и  $\gamma_r = \sqrt{1 + x_r^2}$ . Электронный газ является нерелятивистским при  $T \ll T_r$  и  $x_r \ll 1$  и ультрарелятивистским при  $x_r \gg 1$  или  $T \gg T_r$ . Он невырожден при  $T \gg T_F$  и сильно вырожден при  $T \ll T_F$ .

В качестве примера на рис. 10.1 приведены характерные параметры плазмы внешней коры пульсара [1], где указаны области релятивизма и вырождения плазмы.

Часто используют электронную скорость Ферми,  $v_F = \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial p_F}$ , и соответствующий безразмерный параметр

$$\beta_r = \frac{v_F}{c} = \frac{x_r}{\gamma_r}, \quad (10.7)$$

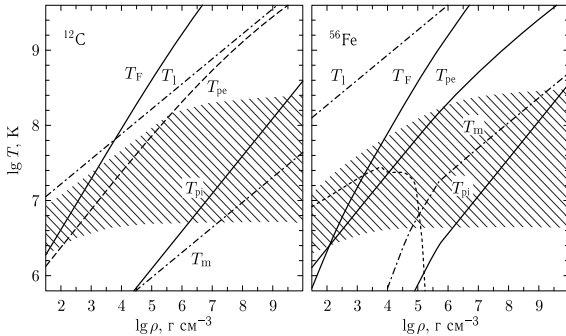


Рис. 10.1. Диаграмма плотность–температура для внешней оболочки, состоящей из углерода (слева) и железа (справа). Показана температура электронов Ферми ( $T_F$ ), температура электронной и ионной плазмы ( $T_{pe}$  и  $T_{pi}$ ), температура постепенного перехода газ-жидкость ( $T_l$ ), и температура резкого фазового перехода жидкость-твердое тело ( $T_m$ ). Заштрихованные области — регионы типичных температур во внешних оболочках охлаждающихся нейтронных звезд среднего возраста (порядка  $10^4$ – $10^6$  лет). Нижняя левая область на правой части, отделенная пунктирной линией, характеризуется сильной реакцией электрона или связанным состоянием (соответствует эффективному заряду  $Z_{ef} < 20$ ). Из [1], воспроизводится с согласия авторов

и параметр плотности  $r_s$ :

$$r_s = \frac{a_e}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{\alpha_f}{x_r} = \frac{0,01400}{x_r}, \quad (10.8)$$

где  $a_e = \left[\frac{3}{4\pi n_e}\right]^{1/3}$ ,  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$  — боровский радиус,  $\alpha_f = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036}$  — постоянная тонкой структуры.

Кулоновское взаимодействие невырожденных электронов характеризуется параметром неидеальности

$$\Gamma_e = \frac{e^2}{a_e k T} \approx \frac{22,75}{T_6} \left(\rho_6 \frac{\langle Z \rangle}{A'}\right)^{1/3}; \quad (10.9)$$

для вырожденного случая часто используется параметр вырождения:  $\theta = T/T_F$ , для нерелятивистского  $x_r \ll 1$  и ультрарелятивистского  $x_r \gg 1$ , он имеет вид  $\theta = 0,543 r_s / \Gamma_e$  и  $\theta \approx (263 \Gamma_e)^{-1}$ , соответственно.

Как мы уже отмечали в гл. 1, в области высоких плотностей,  $x_r > 1$ , электроны становятся релятивистскими. В этом режиме энергия  $\epsilon_F$  весьма велика, так что электронный газ почти идеален.

## 10.2. Ионы

Ввиду большой массы ионов граница их релятивизма сдвигается в область ультравысоких плотностей. В большей же области параметров свойства ионов определяются кулоновским взаимодействием и взаимодействием ядер:

$$\Gamma_j = \Gamma_e Z_j^{5/3} = (Z_j e)^2 / (a_i^{(j)} k_B T), \quad (10.10)$$

где

$$a_i^{(j)} = a_e Z_j^{1/3} \quad (10.11)$$

— радиус ионной сферы. Для многокомпонентной плазмы  $\Gamma = \Gamma_e \langle Z \rangle^{2/3}$ .

При достаточно высоких температурах ионы описываются моделью классического газа Больцмана. С уменьшением температуры в плазме усиливаются эффекты неидеальности и она плавно переходит в сильно неидеальную кулоновскую жидкость, которая в свою очередь через фазовый переход — в кулоновский кристалл [5].

Газовый режим соответствует  $T \gg T_i$ , где

$$T_i = \frac{Z^2 e^2}{a_i k_B} = 2,27 \cdot 10^7 \times Z^2 \left( \frac{\rho_6}{A'} \right)^{1/3} \text{ К.}$$

Для плазмы легких химических элементов  $T_i < T_F$ , а для тяжелых  $T_i > T_F$ . В модели ионных сфер для сильно сжатых кулоновских систем,  $T < T_e$ , плазма разбивается на ионные сферы радиусом  $a_i$ , в центре которых находится ион, окруженный квазиоднородным фоном электронов [6]. Радиус сферы (10.11) выбирается из условия электронейтральности, а суммарный заряд сферы равен нулю.

В режиме малой плотности характерной длиной кулоновского экранирования является дебаевский радиус

$$r_D = q_D^{-1} = \left[ \frac{4\pi}{k_B T} \sum_j n_j (Z_j e)^2 \right]^{-1/2}. \quad (10.12)$$

Для однокомпонентной плазмы  $r_D = a_i / \sqrt{3\Gamma}$ . Для газовой плазмы,  $T \gg T_e$ , волновой вектор экранирования

$$q'_D = (q_D^2 + k_{TF}^2)^{1/2}, \quad (10.13)$$

где  $k_{TF} = r_e^{-1} = \left( 4\pi e^2 \frac{\partial n_e}{\partial \mu_e} \right)^{1/2}$ .

Если электроны невырождены и нерелятивистские ( $T \gg T_F$ ,  $x_r \ll 1$ ), то  $q'_D$  равно  $q_D$  из (10.12) с суммированием по всем сортам ионов и электронам. Как следует из работы [7], ионы кристаллизуются при температуре

$$T_m = \frac{Z^2 e^2}{a_i k_B \Gamma_m} \approx 1,3 \cdot 10^5 \times Z^2 \left( \frac{\rho_6}{A'} \right)^{1/3} \text{ К}, \quad (10.14)$$

где  $T_m$  — температура плавления.

В низкотемпературном режиме поведение электронов и ионов сильно отличается. Электроны, ввиду их вырождения, ведут себя как идеальный ферми-газ, в то время как ионы остаются сильно взаимодействующей кулоновской системой. В этом пределе,  $T \ll T_{pi}$ , квантовые эффекты ионного движения оказываются существенными. Здесь

$$T_{pi} \equiv \frac{\hbar\omega_{pi}}{k_B} \approx 7,832 \cdot 10^6 \left( \frac{\rho_6}{A'} \left\langle \frac{Z^2}{A} \right\rangle \right)^{1/2} \text{ К} \quad (10.15)$$

— температура ионов, связанная с плазменной частотой,

$$\omega_{pi} = (4\pi e^2 n_N (Z^2/m_i))^{1/2}. \quad (10.16)$$

Соответствующий безразмерный параметр

$$t_p = T/T_{pi} \approx 2,92 \langle Z^{1/2} \rangle \langle Z^2/A \rangle^{-1/2} / (\Gamma_e \sqrt{x_r}). \quad (10.17)$$

Для однокомпонентной плазмы  $t_p = \sqrt{R_S/3}/\Gamma$ , где

$$R_S = a_i m_i (Ze)^2 / \hbar^2 = r_s (m_i/m_e) Z^{7/3} \quad (10.18)$$

— ионный параметр, аналогичный электронному  $r_s$  (10.8).

При  $T_{pi} \gg T_m$  колебания ионов понижают температуру плавления (10.14). Это понижение возрастает с увеличением плотности и достигает нуля при определенной плотности (давлении) (см. рис. 10.1).

### 10.3. Полностью ионизованная плазма

Полностью ионизованная плотная плазма предполагает отсутствие нейтралов и соответствует условию, что среднее расстояние между ионами  $a_i$  мало по сравнению с размером ионного остова,  $r_a \sim \frac{a_0}{Z^{1/3}}$  (радиус Томаса–Ферми) [1]. Это соответствует условию  $\rho \gg \rho_{eip} = \left( \frac{m_u}{a_0^3} \right) AZ \approx 11AZ \text{ г/см}^{-3}$  [8], при котором применима весьма популярная в физике плазмы модель электрон-ионной плазмы (eip), состоящей из точечных ионов с зарядом  $Z_{nucl}$ , расположенном на бесструктурном компенсирующем фоне электронов, обеспечивающих электронейтральность (а, следовательно, устойчивость) такой модели плазмы.

Свободная энергия в данной модели имеет вид

$$F = F_{id} + F_{id}^e + F_{ex} + F_{ii} + F_{ei}. \quad (10.19)$$

Кроме очевидных членов,  $F_{ei}$  учитывает взаимодействие ионов и электронного фона (его поляризация),  $F_{ex}$  — корреляции электронной системы. В том случае, если межэлектронное расстояние много меньше, чем размер К-оболочки атома, то нейтрализующий электронный фон можно считать «жестким», а электрон-ионными корреляциями можно пренебречь. Это приводит к условию  $r_s \lesssim 1/2Z$  или  $\rho > \rho_{rigid} \approx 22Z^2 A \text{ г/см}^3$ . К этому же критерию приводит условие малости кулоновского электрон-ионного потенциала  $\sim Ze^2/a_i$  по сравнению с электронной энергией Ферми  $\sim \hbar/m_a a_c^2$ . Эти усло-

вия соответствуют модели плазмы ионов, расположенной на нейтрализующем бесструктурном фоне идеального электронного газа [1].

Термодинамика идеального электронного газа описывается распределением Ферми–Дирака:

$$f^{(0)}(\varepsilon - \mu_e, T) \equiv \frac{1}{\exp[(\varepsilon - \mu_e)k_B T] + 1}, \quad (10.20)$$

где

$$\varepsilon = \sqrt{m_e^2 c^4 + P^2 c^2}, \quad (10.21)$$

— энергия электронов и  $P$  — импульс. Удобно также ввести величину:

$$\chi = (\mu_e - m_e c^2)/k_B T. \quad (10.22)$$

Свободная энергия электронного газа:

$$F_{\text{id}}^{(e)} = \mu_e N_e - p_{\text{id}}^{(e)} V, \quad (10.23)$$

где  $p_{\text{id}}^{(e)}$  — давление идеального газа. Давление и концентрация являются функциями  $\mu_e$  и  $T$ :

$$\begin{aligned} p_{\text{id}}^{(e)} &= 2k_B T \int \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\mu_e - \varepsilon}{k_B T} \right) \right] \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda_e^3} \left[ I_{3/2}(\chi, t_r) + \frac{t_r}{2} I_{5/2}(\chi, t_r) \right], \end{aligned} \quad (10.24)$$

$$n_e = 2 \int f^{(0)}(\varepsilon - \mu_e, T) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4}{\sqrt{\pi} \lambda_e^3} [I_{1/2}(\chi, t_r) + t_r I_{3/2}(\chi, t_r)], \quad (10.25)$$

где  $\lambda_e$  — электронная дебройлевская длина волны и

$$I_\nu(\chi, T) = \int_0^\infty \frac{x^\nu (1 + \tau x/2)^{1/2}}{\exp(x - \chi) + 1} dx \quad (10.26)$$

— интеграл Ферми–Дирака. Внутренняя энергия имеет вид

$$\frac{U_{\text{id}}^{(e)}}{V} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda_e^3} [I_{3/2}(\chi, t_r) + t_r I_{5/2}(\chi, T_r)]. \quad (10.27)$$

В пределе  $t_r \rightarrow 0$ , интегралы (10.26) переходят в нерелятивистские выражения, для которых в работе [9] приведены представления Паде.

Подробные выражения для интегралов Ферми–Дирака и соответствующие термодинамические выражения для всего диапазона параметров вырождения и релятивизма содержатся в работе [1]. В качестве примера на рис. 10.2 приведено давление плазмы и соответствующие релятивистские асимптотики [1].

Видно (рис. 10.2), что с ростом плотности плазмы,  $2\rho Z/A \sim N_e$ , по мере перехода в ультрарелятивистский режим,  $x_r \gg 1$ , уравнение состояния плазмы становится «мягче», что особенно важно для анализа предела Чандрасекара для масс белых карликов.

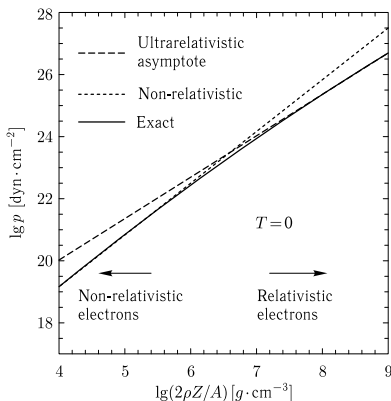


Рис. 10.2. Электронное давление  $p = p_{\text{id}}^{(e)}$  в зависимости от плотности для идеального сильно вырожденного электронного газа (сплошная линия) вместе с нерелятивистской и ультрарелятивистской асимптотами (пунктирные и штриховые линии). Из [1], воспроизводится с согласия авторов

Данная модель, несмотря на сильные упрощения, хорошо описывает термодинамику коры нейтронных звезд (пульсаров) и внутренние области белых карликов [2, 3], составляя основу расчета их структуры и эволюции.

#### 10.4. Ионная жидкость. Однокомпонентная плазма

Свободная энергия идеальных классических нерелятивистских ионов имеет вид

$$F_{\text{id}}^{(i)} = Nk_{\text{B}}T[\ln(n_N\lambda_i^3/g_i) - 1], \quad (10.28)$$

где  $g_i$  — спиновое вырождение.

Электрон-ионное взаимодействие «ei» может быть описано моделью однокомпонентной плазмы (ОКП), в которой все термодинамические величины являются функцией одного безразмерного параметра  $\Gamma$  [10].

В режиме слабой неидеальности ( $\Gamma \ll 1$ ) применима модель Дебая–Хюккеля [11]:

$$\frac{F_{\text{ex}}(\Gamma \rightarrow 0)}{V} = -\frac{2e^3}{3} \left( \frac{\pi}{k_{\text{B}}T} \right)^{1/2} \left( \sum_j n_j Z_j^2 \right)^{3/2}. \quad (10.29)$$

Для ОКП

$$\begin{aligned} U_{\text{ii,DH}} &= -(\sqrt{3}/2)Nk_{\text{B}}T\Gamma^{3/2}, \\ F_{\text{ii,DH}} &= -(1/\sqrt{3})Nk_{\text{B}}T\Gamma^{3/2}. \end{aligned} \quad (10.30)$$

Абэ [12], используя теорию возмущения, нашел поправки порядка  $\Gamma^2$  к (10.30).

Следующие поправки были найдены в работе [13]. Внутренняя энергия в пределе малых  $\Gamma$  имеет вид

$$\frac{U_{ii}}{k_B T N} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Gamma^{3/2} - 3\Gamma^3 \left[ \frac{3}{8} \ln(3\Gamma) + \frac{C_E}{2} - \frac{1}{3} \right] - \Gamma^{9/2} (1,6875\sqrt{3} \ln \Gamma - 0,23511) + \dots, \quad (10.31)$$

где  $C_E = 0,57721 \dots$  — постоянная Эйлера. Из (10.30) следует, что

$$\frac{F_{ii}}{k_B T N} = -\frac{\Gamma^{3/2}}{\sqrt{3}} - \Gamma^3 \left( \frac{3}{8} \ln \Gamma + 0,24225 \right) - \Gamma^{9/2} (0,64952 \ln \Gamma - 0,19658) + \dots \quad (10.32)$$

Для описания ОКП при больших параметрах неидеальности  $\Gamma$  применяются различные численные методы (см. гл. 5) [14, 15] и методы интегральных уравнений (см. гл. 2).

В последнем случае показано [1] (в том числе прямыми экспериментами с «пылевой» плазмой (гл. 2)), что гиперцепное (HNC) интегральное уравнение обладает определенными преимуществами для неидеальной плазмы.

К настоящему времени проведены исчерпывающие расчеты свойств ОКП методом Монте–Карло и методом интегральных (HNC) уравнений в широком диапазоне параметров неидеальности  $1 < \Gamma < 160$  [16].

Квантовая поправка к свободной энергии Гельмгольца в ОКП, согласно [17], имеет вид

$$F_q = \frac{\pi \hbar^2 N n_N (Ze)^2}{6 m_i k_B T} = N \frac{k_B T_{pi}^2}{24 T}. \quad (10.33)$$

Эта поправка носит название Вигнера–Кирквуда или дифракционной, и имеет тот же вид в жидкой и твердой фазах.

Расчету этих поправок методом интегралов по траекториям Монте–Карло посвящены работы [18, 19].

Для широкодиапазонного расчета термодинамики ОКП в работе [22] предложена аппроксимация:

$$\frac{U_{ii}}{k_B T N} = \Gamma^{3/2} \left( \frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right) + \frac{B_1 \Gamma^2}{B_2 + \Gamma} + \frac{B_3 \Gamma^2}{B_4 + \Gamma^2}, \quad (10.34)$$

где

$$A_1 = -0,9070, \quad A_2 = 0,62954, \quad A_3 = -\sqrt{3}/2 - A_1/\sqrt{A_2}, \\ B_1 = 0,00456, \quad B_2 = 211,6, \quad B_3 = -0,0001 \text{ и } B_4 = 0,00462.$$

На рис. 10.3 эта формула сопоставляется с расчетами Монте–Карло [20], гиперцепным приближением HNC [21] и моделью Дебая–Хюккеля (10.29).

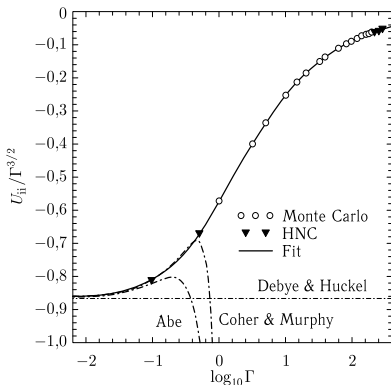


Рис. 10.3. Сравнение приближения (10.34) с приближениями Дебая–Хюккеля, Абэ и Коэн–Мерфи при малых  $\Gamma$  и с расчетами методами Монте–Карло и HNC. Из [1], воспроизводится с согласия авторов

Интегрирование (10.34) по  $\ln \Gamma$  дает:

$$\begin{aligned} \frac{F_{ii,liq}}{N_N k_B T} = & A_1 \left[ \sqrt{\Gamma(A_2 + \Gamma)} - A_2 \ln \left( \sqrt{\Gamma/A_2} + \sqrt{1 + \Gamma/A_2} \right) \right] + \\ & + 2A_3 \left[ \sqrt{\Gamma} - \arctg(\sqrt{\Gamma}) \right] + \\ & + B_1 \left[ \Gamma - B_2 \ln \left( 1 + \frac{\Gamma}{B_2} \right) + \frac{B_3}{2} \ln \left( 1 + \frac{\Gamma^2}{B_4} \right) \right]. \quad (10.35) \end{aligned}$$

Эта формула описывает  $F_{ii}$  с точностью 0,02% для всех  $\Gamma$  в газовой и жидкой фазах.

Соответствующий вклад в давление и теплоемкость имеет вид

$$p_{ii} = \frac{1}{3} \frac{U_{ii}}{V}, \quad (10.36)$$

$$\begin{aligned} C_{V,ii} = N_N k_B \left[ \frac{\Gamma^{3/2}}{2} \left( -\frac{A_1 A_2}{(A_2 + \Gamma)^{3/2}} + \frac{A_3(\Gamma - 1)}{(1 + \Gamma)^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{B_1 B_2 \Gamma^2}{(B_2 + \Gamma)^2} + \frac{B_3(\Gamma^4 - B_4 \Gamma^2)}{(B_4 + \Gamma^2)^2} \right]. \quad (10.37) \end{aligned}$$

Кулоновское давление  $p_{ii}$  составляет точно 1/3 плотности кулоновской энергии, так как  $U_{ii}/V$  зависит в классическом случае только от  $\Gamma$ . Кулоновские  $p_{ii}$  и  $U_{ii}$  имеют отрицательный знак.

Эта связь мала в пределе слабой неидеальности  $|U_{ii}| \ll kT$ , так что ионы двигаются почти свободно. В пределе сильной неидеальности ( $\Gamma \gtrsim 1$ )

$|U_{ii}| \gtrsim NkT$  реализуется, по-существу, кулоновская жидкость, в которой ионы колеблются в кулоновских потенциальных ямах, глубиной  $\sim \frac{Z^2 e^2}{a_i}$ , которые в свою очередь мигрируют в пространстве. В пределе  $\Gamma \gg 1$  из (10.34) следует линейная зависимость от  $\Gamma$ ,  $\frac{U_{ii}}{NkT} \approx A_1 \Gamma$ , а величины  $U_{ii} \approx NA_1 \frac{Z^2 e^2}{a_i}$  и  $P_{ii} \approx A_1 n_N e^2 / 3a_i$  слабо зависят от температуры. Параметр  $A_1$  близок к  $A_1^{\text{IS}} = -0,9$  в модели ионных сфер (гл. 3, 4). В этой модели кулоновская энергия ионной сферы  $\left( -\frac{0,9Z^2 e^2}{a_i} \right)$  включает электрон-электронное и электрон-ионное взаимодействия:  $\frac{0,6Z62e^2}{a_i}$  и  $-1,5\frac{Z^2 e^2}{a_i}$  [6].

### 10.5. Кулоновский кристалл

При  $T < T_m$  беспорядочное движение ионов сменяется их колебательным движением около положения равновесия, что соответствует кристаллическому состоянию, которое становится основным состоянием ОКП ионов в пределе высоких плотностей,  $r_s \ll 1$ . В этом пределе ОКП образует объемно-центрированную кубическую (ОЦК) решетку, в то время как при  $r_s \gtrsim 1$  [23] реализуются гранецентрированные кубические (ГЦК) и гексагональные плотнупакованные (ГПУ) структуры. Заметим, что простые кубические кулоновские типы решеток (как и все кубические решетки с центральными силами) оказываются неустойчивыми [24].

При изучении сильносжатых кулоновских систем часто реальную решетку Вигнера–Зейтца заменяют сферической, с радиусом равным радиусу ионной сферы  $a_i$  (10.11) со сферической зоной Бриллюэна эквивалентного радиуса,  $v_{\text{BZ}} = (6\pi n_N)^{1/3}$ .

Для классического кулоновского кристалла в гармоническом приближении можно получить [1]:

$$F_{ii, \text{harm}} = U_M + N_N k_B T \left( \frac{3}{2} \ln \Gamma + 1 + 3\bar{l} + \frac{1}{2} \ln \frac{6}{\pi} \right), \quad (10.38)$$

где  $U_M$  — классическая энергия кристаллической решетки,  $\bar{l} = \langle \ln(\omega_{ks}/\omega_{pi}) \rangle_{ph}$ ,  $\omega_{ks}$  — собственные значения частоты колебаний ионов в решетке,  $\omega_{pi}$  — их плазменная частота.

В квантовом пределе,  $T \ll T_{pi}$ ,

$$F_i = U_0 - \frac{\zeta N_N k_B T}{12} \left( \frac{T}{T_{pi}} \right)^3. \quad (10.39)$$

где  $U_0 = U_M + U_q$ ,  $U_q = 3/2 N_N \hbar \omega_{pi} \cdot u_1$ .

Формулы для общего случая приведены в работе [1].

Ангармонизм колебаний кулоновского кристалла подробно изучен численными методами [25–28].

Для этого случая предложены многочисленные аппроксимации, например, [25]:

$$\frac{U_{\text{anharm,cl}}}{N_N k_B T} = \sum_{p \geq 1} \frac{a_p}{\Gamma^p}, \quad (10.40)$$

$$\frac{F_{\text{ii,anharm,cl}}}{N_N k_B T} = - \sum_{p \geq 1} \frac{a_p}{p \Gamma^p}. \quad (10.41)$$

В работе [28] представлены расчеты и соответствующие аппроксимации в широком диапазоне кристаллического состояния до  $\Gamma \lesssim 3000$ .

Плавление кулоновского кристалла возникает при равенстве химических потенциалов жидкости и кристалла  $\mu_e(T) = \mu_c(T)$  в точке  $T_m$ . Величина  $T_m$  определяется с невысокой точностью ввиду близости наклонов кривых  $\mu_e(T)$  и  $\mu_c(T)$ .

Используя критерий Линдемана в [29] найдено значение  $\Gamma_m = 170 \pm 10$ . В дальнейшем величина  $\Gamma_m$  многократно уточнялась аналитическими и численными методами, но не претерпела значительных изменений. В работе [22] получено значение  $\Gamma_m = 175,0 \pm 0,4$ . Заметим, что данные по прямым наблюдениям плавления ионного кристалла в опытах с пылевой плазмой [2, 5] также дают близкие к вышеназванным значениям  $\Gamma_m$ . Являясь фазовым переходом первого рода, это плавление соответствует слабым изменениям термодинамических функций. Так, согласно [1], скачок плотности энергии при кристаллизации в ОЦК решетки  $\Delta U_i/V \approx 0,76 n_N k T_m$ ,  $\Delta U_i/U_i \approx 0,5\%$ , а скачок давления  $\Delta p_i/p_i$  в три раза меньше. Скачок плотности при этом исчезающе мал. Тем не менее, даже эта малая величина играет заметную роль в расчете структуры и эволюции таких астрофизических объектов как белые карлики [30, 31].

При высоких плотностях плазмы амплитуды квантовых колебаний (при  $T = 0$ ) становятся сравнимыми с межионным расстоянием, что приводит к «квантовому» плавлению ионных кристаллов (см. гл. 8 и [27, 32–34]). Это приводит к понижению  $T_m$  по сравнению с классическим значением и даже к  $T_m(\rho_m) = 0$ . При  $\rho > \rho_m$  жидкость не кристаллизуется вообще и, по существу, является квантовой при  $T \lesssim T_{pi}$ . Этот эффект квантового плавления особенно важен для плазмы водорода и гелия и вряд ли проявляется для тяжелых элементов типа углерода, кислорода и азота даже в условиях коры нейтронных звезд [1].

Упрощенное УРС вырожденного электронного газа [1] представляет собой УРС идеального электронного газа с поправкой на кулоновское взаимодействие, описываемое моделью ионных сфер,  $p_{ii} \approx -0,3 n_N Z^2 e^2 / a_i$ :

$$p = \frac{p_r}{8\pi^2} \left[ x_r \left( \frac{2}{3} x_r^2 - 1 \right) \gamma_r + \ln(x_r + \gamma_r) \right] - 0,3 n_N \frac{Z^2 e^2}{a_i}. \quad (10.42)$$

В ультрарелятивистском случае ( $x_r \gg 1$ ) оба члена  $p_{id}^e$  и  $p_{ii}$  пропорциональны  $x_r^4$  так, что их отношение не зависит от плотности:

$$\frac{p_{ii}}{p_{id}^{(e)}} = -\frac{6}{5} \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{Z^{2/3} e^2}{\hbar c} \approx -0,0046 Z^{2/3}. \quad (10.43)$$

Для плазмы железа это отношение равно  $-0,04$ . Для нерелятивистского электронного газа  $p_{id}^e \sim x_r^5$ , а  $p_{ii} \sim x_r^4$ , что дает:

$$\frac{p_{ii}}{p_{id}^{(e)}} = -\frac{3}{2} \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{Z^{2/3} e^2}{\hbar c \beta_r} \approx -0,0057 \frac{Z^{2/3}}{x_r}. \quad (10.44)$$

С уменьшением  $\rho$  кулоновское взаимодействие усиливается и давление по (10.42) обращается в нуль при  $\rho \approx 0,18ZA$  г/см<sup>3</sup>. Но и само уравнение (10.42) перестает работать еще раньше, так как становится неверным приближение жесткого несжимаемого фона электронов, лежащего в основе модели ионных сфер. Поэтому условием применимости уравнения (10.42) является  $T \ll T_F$ ,  $\rho \gg \rho_{eip}$  и  $T \lesssim T_e$ . Это соответствует режиму сильного сжатия и нарушается при высоких  $T$ , где кулоновское взаимодействие мало и полное давление определяется давлением электронов. Поэтому уравнение (10.42) часто применяют и вне области его формальной справедливости.

Промежуточная область параметров умеренных температур и плотностей, промежуточных между полной ионизацией и «тепло» невырожденной и квазиидеальной описывается обычно [1] интерполяциями. В основу этих интерполяций часто закладываются модели «среднего» иона, когда плазма состоит из электронов и ионов характерного заряда  $Z_{ef}$ , который в простейшем случае равен среднему по ансамблю ионному заряду. Именно так построены интерполяции [35, 37].

Другим способом описания обсуждаемой здесь «промежуточной» области параметров является семейство квазиклассических моделей Томаса–Ферми (гл. 6).

При очень низких  $T$  и  $\rho$ , соответствующих большим  $\Gamma$  и  $r_s$ , ОКП электронов ведет себя как ОКП ионов, что позволяет применить к электронной плазме предыдущий формализм, развитый для ионов. Но здесь особую роль начинают играть квантовые эффекты обмена (принцип Паули).

Изучению этих обменно-корреляционных эффектов посвящена обширная литература. В работе [38] это сделано на основе вариационного принципа. Использование приближения локальной плотности в методе функционала плотности с эффективным экранированным потенциалом позволило авторам [39] найти соответствующие поправки при малых  $\Gamma_e$  и произвольных  $\theta$ . В работе [27] показано, что значение  $\Gamma_m$  увеличивается с ростом  $r_s$  и стремится к бесконечности при  $r_s \leq 200$ . Таким образом, электронная жидкость не замерзает при любых  $T$ , если  $n_e > 1,3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. В работе [39] была получена обменная энергия (метод Хартри–Фока):  $F_{NF}(\theta) = (e^2/a_0) a(\theta)/r_s$ , где

$$a \equiv \left( \frac{9}{4\pi^2} \right)^{1/3} \frac{0,75 + 3,04363\theta^2 - 0,09227\theta^3 + 1,7035\theta^4}{1 + 8,31051\theta^2 + 5,1105\theta^4} \text{th} \frac{1}{\theta}. \quad (10.45)$$

В обзоре [40] обобщены имеющиеся аналитические и численные результаты в виде интерполяционной формулы

$$-\frac{F_{xc}^{\text{nonrel}}}{k_B T N_e} = q\Gamma + \frac{2A}{f}\sqrt{\Gamma} + \left(\frac{B}{f} - \frac{dA}{f^2}\right) \ln |f\Gamma + d\sqrt{\Gamma} + 1| - \\ - \frac{2(dB + CA)}{fD} \left[ \arctg\left(\frac{2f\sqrt{\Gamma} + d}{D}\right) - \arctg\left(\frac{d}{D}\right) \right]. \quad (10.46)$$

где  $A = b - qd$ ,  $B = a - q$ ,  $C = 2 - d^2/f$ ,  $D = \sqrt{4f - d^2}$ ,  $a = a(\theta)$  описываются соотношениями из [1], а  $b$ ,  $d$ ,  $f$  и  $q$  — следующие функции [15]:

$$b = \sqrt{\theta} \operatorname{th} \left( \frac{1}{\sqrt{\theta}} \right) \frac{0,341308 + 12,0708\theta^2 + 1,148889\theta^4}{1 + 10,495346\theta^2 + 1,326623\theta^4}, \\ d = \sqrt{\theta} \operatorname{th} \left( \frac{1}{\sqrt{\theta}} \right) \frac{0,614925 + 16,9966055\theta^2 + 1,1489056\theta^4}{1 + 10,10935\theta^2 + 1,22184\theta^4}, \\ f = \theta \operatorname{th} \left( \frac{1}{\theta} \right) \frac{0,539409 + 2,522206\theta^2 + 0,178484\theta^4}{1 + 2,555501\theta^2 + 0,146319\theta^4}, \\ q = 0,872496 + 0,025248 \exp(-1/\theta).$$

Хотя этот результат относится к нерелятивистскому случаю, он имеет широкий диапазон применения, так как электронный газ почти идеален в релятивистской области параметров. В этой области (релятивизм) [41]

$$\frac{F_x^{\text{(rel)}}}{N_e k_B T} = \frac{3\alpha_f}{4\pi} \frac{1}{x_r^3 t_r} \left[ f_0(x_r) + f_2(x_r, t_r) t_r^2 + f_4(x_r) t_r^4 \right], \quad (10.47)$$

где

$$f_0(x) = \frac{3}{3} \frac{L^2(x)}{1+x^2} - 3xL(x) + \frac{3}{2}x^2 + \frac{x^4}{2}, \\ f_2(x, \tau) = \frac{\pi^2}{3} \left[ 2 \ln \left( \frac{2x^2}{\tau} \right) + x^2 - \frac{3L(x)}{x} - 0,7046 \right], \\ f_4(x) = \frac{\pi^4}{18} \left( 1 - \frac{1,1}{x^2} - \frac{3,7}{x^4} - \frac{6,3}{x^5} L(x) \right), \quad L(x) = \sqrt{1+x^2} \ln(x + \sqrt{1+x^2}).$$

До сих пор мы использовали модель ОКП точечных зарядов на жестком однородном фоне компенсирующего заряда противоположного знака. Этот фон предполагался бесструктурным и однородным, и его введение имело цель обеспечение условия электронейтральности (устойчивости) кулоновской системы.

В реальной плазме ионов и электронов ионное взаимодействие экранируется электронами. В том случае, когда электронная поляризация слаба (например, при  $Ze^2/a_e \ll kT_F$ ) поляризация может быть учтена моделью линейного отклика [42].

При  $r_s \ll 1$  и  $T \ll T_F$  поляризационные поправки вычисляются, например, в приближении хаотических фаз [43]. В более сложном случае, если  $r_s \lesssim 1$

и  $T \lesssim T_F$ , применяются методы Монте-Карло [44] или псевдопотенциальные модели [15].

В работе [22] приведены аппроксимационные формулы для поляризационных поправок, расчет по которым представлен на рис. 10.4 [1] для релятивистского и нерелятивистского случаев.

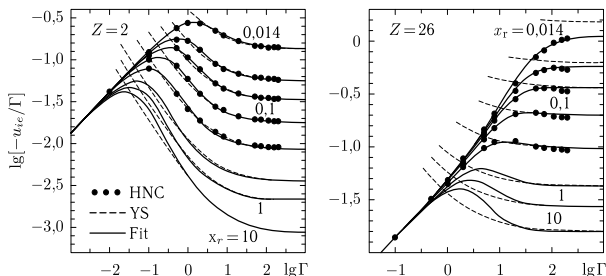


Рис. 10.4. Скрининговая часть свободной энергии для электрон-ионной плазмы с  $Z = 2$  (слева) и  $Z = 26$  (справа) в зависимости от  $\Gamma$ . Расчеты для конечной температуры [21] (точки) и для нулевой температуры [10] (справедливо при малых  $r_s$  и больших  $\Gamma$ ; штриховые линии). Номера на кривых указывают значения  $x_r = 0,014/r_s$  (сверху вниз,  $x_r = 0,014; 0,034; 0,058; 0,1; 0,22; 0,55; 1, 10$ ). Из [22], воспроизводится с согласия авторов

Учет поляризации электронов в кристаллической модели плазмы представляет особые трудности [1]. Для классических ионов здесь используется модель, основанная на замене кулоновского потенциала на потенциал Юкавы с последующим применением численного метода молекулярной динамики [45]. Эти расчеты показали, что с уменьшением радиуса экранирования, значение параметра плавления  $\Gamma_m$  сдвигается в область повышенных значений. Вместе с тем, когда радиус экранирования (в формализме потенциала Юкавы этот радиус является внешним параметром) потенциала Юкавы становится меньше дебаевского радиуса, в системе появляется второй фазовый переход при больших  $\Gamma$  из ОЦК в ГПУ решетку. Эксперименты с пылевой плазмой [5, 46], по-видимому, подтверждают этот вывод.

В классической области для учета эффектов поляризации для кристаллической плазмы предложены следующие аппроксимации [22]:

$$\frac{F_{ei}}{NkT} = -f_\infty(x_r)\Gamma[1 + A(x_r)/\Gamma^s], \quad (10.48)$$

где

$$f_\infty(x) = a_{TF}Z^{2/3}b_1\sqrt{1 + b_2/x^2}, \quad A(x) = \frac{b_3 + a_3x^2}{1 + b_4x^2},$$

$$s = [1 + 0,01(\ln Z)^{3/2} + 0,097Z^{-2}]^{-1},$$

$$b_1 = 1 - a_1 Z^{-0,267} + 0,27 Z^{-1}, \quad b_2 = 1 + \frac{2,25}{z^{1/3}} \frac{1 + a_2 Z^5 + 0,222 Z^6}{1 + 0,222 Z^6},$$

$$b_3 = a_4 / (1 + \ln Z), \quad b_4 = 0,395 \ln Z + 0,347 Z^{-3/2}.$$

Параметр  $a_{TF}$  выбран так, что отображает асимптотику Томаса–Ферми при  $Z \rightarrow \infty$ :

$$a_{TF} = \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{a_f}{Z^{7/3}} c_\infty = \frac{54}{175} \left( \frac{12}{\pi} \right)^{1/3} \cdot \alpha_f \approx 0,00352.$$

Коэффициенты  $a_1$ – $a_4$  можно найти в работе [22]. Модификация этого приближения, справедливая не только в классической, но и в квантовой области, приведена в работе [47].

Результаты предыдущего анализа показывают [1], что эффекты поляризации в кулоновском кристалле обычно не очень велики, они не исчезают даже при больших  $\Gamma$  и  $x_T$  и имеют смысл усиления связи в кристалле. В сильно сжатой кулоновской жидкости эта поправка  $\sim (k_{TF} a)^2$  и стремится к конечной величине в релятивистской области. При релятивистских плотностях вклад поляризации в давление  $p_{ei}$  имеет ту же плотностную зависимость, что и в нерелятивистском случае,  $p_{ei} \sim \rho^{4/3}$ . Несмотря на малость, эта поправка оказывает заметное влияние на плавление кулоновского кристалла и может даже изменить тип симметрии кристалла на кривой плавления (от ОЦК к ГЦК решетке).

Отметим, что в отличие от хорошо изученного твердого тела, при приведенном выше анализе кулоновских кристаллов, авторы не касаются сложного вопроса электронного спектра энергии, что может сильно изменить ситуацию.

В области низких температур в плазме существенны процессы термической и плотностной диссоциации и ионизации, так что состав плазмы является сложной функцией температуры и плотности. Методы расчета термодинамических свойств и состава такой многокомпонентной плазмы с учетом эффектов межчастичного взаимодействия и вырождения мы уже рассмотрели в гл. 4.

В этой главе мы рассмотрели широкодиапазонное описание релятивистской плазмы без магнитного поля. Для плазмы в квантующем магнитном поле аналогичное рассмотрение приведено в работе [48].

### Список литературы

1. *Haensel P., Potekhin A. Y., Yakovlev D. G.* Neutron stars 1: Equation of state and structure. — N.Y.: Springer, 2007. — V. 326 of Astrophysics and Space Science Library.
2. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
3. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
4. *Salpeter E. E.* Energy and pressure of a zero-temperature plasma // *Astrophys. J.* — 1961. — V. 134. — P. 669.
5. *Пылевая плазма (эксперимент и теория) / Ваулина О. С., Петров О. Ф., Фортвов В. Е. и др.* — М.: АНО «ФИЗМАТЛИТ», 2009.

6. *Shapiro S. L., Teukolsky S. A.* Black Holes, White Dwarfs, and Neutron Stars: The Physics of Compact Objects. — N.Y.: Wiley, 1983. (*Шапиро С., Тьюколски С.* Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды / Пер. с англ. Под ред. Я. А. Смородинского. — В 2-х ч. — М.: Мир, 1985.)
7. *Абрикосов А. А.* Некоторые свойства сильно сжатого вещества // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 39. — С. 1797.
8. *Pethick C. J., Ravenhall D. G.* Matter at large neutron excess and the physics of neutronstar crusts // *Annu. Rev. Nucl. Sci.* — 1995. — V. 45. — P. 429.
9. *Antia H. M.* Rational function approximations for Fermi-Dirac integrals // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 1993. — V. 84. — P. 101.
10. *Yakovlev D. G., Shalybkov D. A.* Degenerate cores of white dwarfs and envelopes of neutron stars: thermodynamics and plasma screening in thermonuclear reactions // *Sov. Sci. Rev., Ser. E: Astrophys. Space Phys.* — 1989. — V. 7. — P. 311.
11. *Debye P., Hückel E.* Zur Theorie der Elektrolythe // *Physikalische Z.* — 1923. — V. 24. — P. 185.
12. *Abe R.* Giant cluster expansion theory and its application to high-temperature plasma // *Progr. Theor. Phys.* — 1959. — V. 22. — P. 213.
13. *Cohen E. G. D., Murphy T. J.* New results in the theory of the classical electron gas // *Phys. Fluids.* — 1969. — V. 12. — P. 1403.
14. *Baus M., Hansen J. P.* Statistical mechanics of simple Coulomb systems // *Phys. Rep.* — 1980. — V. 59. — P. 1.
15. *Ichimaru S., Iyetomi H., Tanaka S.* Statistical physics of dense plasmas: thermodynamics, transport coefficients and dynamic correlations // *Phys. Rep.* — 1987. — V. 149. — P. 91.
16. *DeWitt H., Slattery W., Chabrier G.* Numerical simulation of strongly coupled binary ionic plasmas // *Physica B.* — 1996. — V. 228. — P. 21.
17. *Hansen J. P.* Statistical mechanics of dense ionized matter. I. Equilibrium properties of the classical one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8. — P. 3096.
18. *Jones M. D., Ceperley D.* Crystallization of the one-component plasma at finite temperature // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 76. — P. 4572.
19. *Militzer B., Pollock E. L.* Equilibrium contact probabilities in dense plasmas // *Phys. Rev. B.* — 2005. — V. 71. — P. 134303.
20. *DeWitt H., Slattery W.* Screening enhancement of thermonuclear reactions in high density stars // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — V. 39. — P. 97.
21. *Chabrier G., Potekhin A.* Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1998. — V. 58. — P. 4941.
22. *Potekhin A., Chabrier G.* Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas. II. Extension to relativistic densities to the solid phase // *Phys. Rev. E.* — 2000. — V. 62. — P. 8554.
23. *Kohanoff J., Hansen J. P.* Statistical properties of the dense hydrogen plasma: An ab initio molecular dynamics investigation // *Phys. Rev. E.* — 1996. — V. 54. — P. 768.
24. *Born M.* On the stability of crystal lattices. I. // *Proc. Cambridge Phil. Soc.* — 1940. — V. 36. — P. 160.
25. *Pollock L., Hansen J. P.* Statistical mechanics of dense ionized matter. II. Equilibrium properties and melting transition of the crystallized one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1973. — V. 8. — P. 3110.
26. *Albers R. C., Gubernatis J. E.* Low-order anharmonic contributions to the internal energy of the one-component plasma // *Phys. Rev. B.* — 1986. — V. 33. — P. 5180.
27. *Nagara H., Nagata Y., Nakamura T.* Melting of the Wigner crystal at finite temperature // *Phys. Rev. A.* — 1987. — V. 36. — P. 1859.

28. *Farouki R., Hamaguchi S.* Thermal energy of the crystalline one-component plasma from dynamical simulations // *Phys. Rev. E.* — 1993. — V. 47. — P. 4330.
29. *Van Horn H. M.* Crystallization of a classical one-component Coulomb plasma // *Phys. Lett. A.* — 1969. — V. 28. — P. 706.
30. *Chabrier G.* Review on white dwarf cooling theory // 11th European Workshop on White Dwarfs / Ed. by S. E. Solheim, E. G. Meistas. — 1999. — V. 169 of ASP Conf. Ser. — P. 369.
31. *Hansen B. M. S.* The astrophysics of cool white dwarfs // *Phys. Rep.* — 2004. — V. 399. — P. 1.
32. *Mochkovich R., Hansen J. P.* Fluid-solid coexistence curve of dense Coulombic matter // *Phys. Lett. A.* — 1979. — V. 73. — P. 35.
33. *Ceperley D., Alder B. J.* Ground state of the electron gas by a stochastic method // *Phys. Rev. Lett.* — 1980. — V. 45. — P. 566.
34. *Chabrier G.* Quantum effects in dense Coulombic matter — Application to the cooling of white dwarfs // *Astrophys. J.* — 1993. — V. 414. — P. 695.
35. *Fontaine G., Graboske H. C., Jr., Van Horn H. M.* Equation of state for stellar partial ionization zones // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 1977. — V. 35. — P. 293.
36. *Rogers F. J., Swenson F. J., Iglesias C. A.* OPAL equation-of-state tables for astrophysical applications // *Astrophys. J.* — 1996. — V. 456. — P. 902.
37. *Potekhin A. Y., Chabrier G., Yakovlev D. G.* Internal temperatures and cooling of neutron stars with accreted envelopes // *Astron. Astrophys.* — 1997. — V. 323. — P. 415.
38. *Pokrant M. A.* Thermodynamic properties of the nonzero-temperature, quantum-mechanical, one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1977. — V. 16. — P. 413.
39. *Perrot F., Dharma-wardana C.* Equation of state of dense hydrogen and the plasma phase transition; A microscopic calculational model for complex fluids // *The Equation of State in Astrophysics* / Ed. by G. Chabrier, E. Schatzman. — Cambridge: Cambridge University Press, 1994. — P. 272.
40. *Ichimaru S., Iyetomi H., Tanaka S.* Statistical physics of dense plasmas: thermodynamics, transport coefficients and dynamic correlations // *Phys. Rep.* — 1987. — V. 149. — P. 91.
41. *Shaviv G., Kovetz A.* The thermodynamics of white dwarf matter. II // *Astron. Astrophys.* — 1972. — V. 16. — P. 72.
42. *Galam S., Hansen J. P.* Statistical mechanics of dense ionized matter. VI. Electron screening corrections to the thermodynamic properties of the one-component plasma // *Phys. Rev. A.* — 1976. — V. 14. — P. 816.
43. *Jancovici B.* On the relativistic degenerate electron gas // *Nuovo Cimento.* — 1962. — V. 25. — P. 428.
44. Equation of state of the hydrogen plasma by path integral Monte Carlo simulation / *Pierleoni C., Ceperley D. M., Bernu B., Magro W. R.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — V. 73. — P. 2145.
45. *Hamaguchi S., Farouki R. T., Dubin D. H. E.* Triple point of Yukawa systems // *Phys. Rev. E.* — 1997. — V. 56. — P. 4671.
46. Пылевая плазма / *Фортос В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А. и др.* // *УФН.* — 2004. — Т. 174, № 5. — С. 495.
47. *Potekhin A. Y., Chabrier G.* Thermodynamic functions of dense plasmas: analytic approximations for astrophysical applications // *Contrib. Plasma Phys.* — 2010. — V. 50. — P. 82.
48. *Potekhin A. Y., Chabrier G.* Equation of state for magnetized Coulomb plasmas // *Astron. Astrophys.* — 2013. — V. 550. — P. A43.

## ЯДЕРНЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ПРИ СИЛЬНЫХ СЖАТИЯХ

На рисунке 11.1 приведены характерные размеры и времена движения молекулярных, атомных и ядерных объектов [1], а на рис. 11.2, — характерные размеры различных структурных состояний вещества. Ввиду того, что атомные и ядерные размеры различаются на 5–6 порядков, при условии  $\rho \ll \rho_0 \approx 2,8 \cdot 10^{14} \text{ г/см}^3$ , соответствующие процессы можно рассматривать независимо. Хотя они, конечно, жестко связаны при любых  $\rho$ , так как структура ядра и его заряд напрямую определяет электронную структуру атомов или ионов, а также агрегатное состояние вещества.

Исходя из этого, в предыдущих главах мы уделяли основное внимание электронным и ионным компонентам вещества и описанию их термодинамических свойств в различных частях фазовой диаграммы. При этом процессы в ядрах не рассматривались ввиду недостаточно высокой,  $\rho \lesssim 10^{10} \text{ г/см}^3$ , плотности плазмы, так что свойства ядер предполагались такими же, как при нормальных лабораторных условиях.

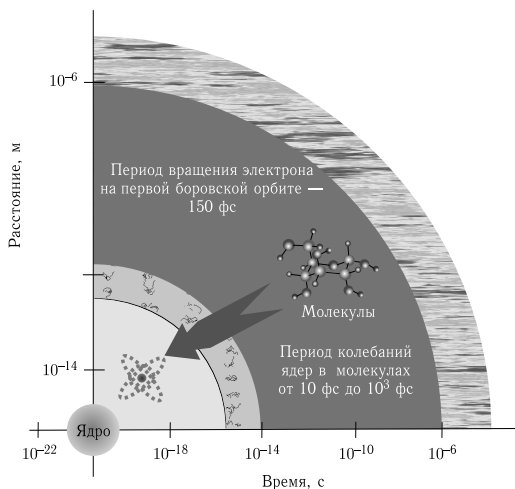


Рис. 11.1. Пространственно-временные характеристики атомных и ядерных объектов [1]

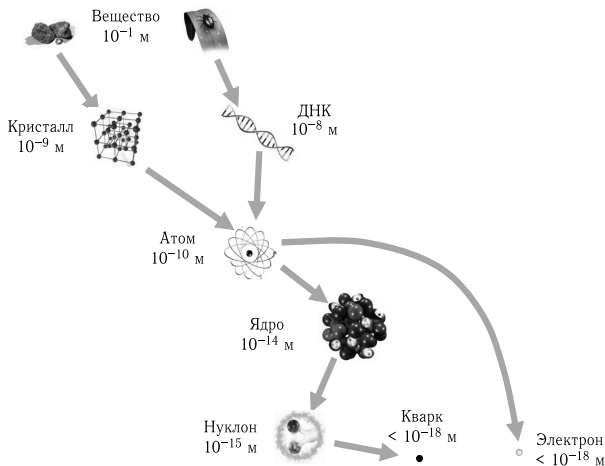


Рис. 11.2. Характерные размеры структурных элементов вещества

Двигаясь вверх по шкале давлений и температур, мы, приближаясь к ядерному диапазону плотностей  $\rho \approx \rho_0$ , обязаны учитывать ядерные трансформации, соответствующие возникновению новых форм ядерной материи при ультраэкстремальных состояниях [2, 3]. Открывающиеся здесь возможности

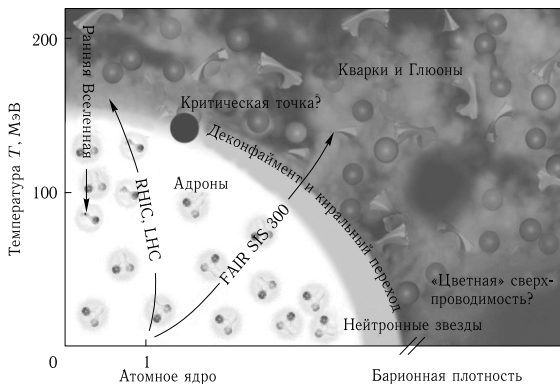


Рис. 11.3. Фазовая диаграмма ультраплотного вещества [4, 5]

приведены на фазовой диаграмме ядерной материи (рис. 11.3), где отмечены экспериментальные возможности современных ускорителей RHIC, LHC (высокие разогревы и умеренные плотности ядерного вещества), и также FAIR SIS-300 (высокая барионная плотность). Там же приведены параметры нейтронных звезд [3], возникающих при гравитационном сжатии массивных,  $M > M_{\odot}$ , звезд на конечных стадиях их эволюции.

Оставляя обсуждение экспериментов по релятивистскому столкновению ядер до следующей главы, рассмотрим кратко физические условия в нейтронных звездах [2, 3].

### 11.1. Экстремальные состояние нейтронных звезд

В зависимости от начальной массы звезды солнечного химсостава, после завершения термоядерной эволюции, в звездных недрах могут возникать три типа компактных остатков: белые карлики, нейтронные звезды и черные дыры [6, 7].

Нейтронные звезды являются, пожалуй, наиболее экзотическими астрономическими объектами, в которых реализуется широкий спектр суперэкстремальных состояний вещества [8, 9], фактически недоступных для лабораторного исследования. Поэтому нейтронные звезды в каком-то смысле выполняют роль «космической лаборатории», когда по их наблюдаемым проявлениям можно судить о поведении вещества в суперэкстремальных условиях — при сверхядерных плотностях, сверхсильных магнитных полях, при сверхтекущей барионной компоненте и интенсивных ядерных превращениях ультрасжатого вещества. Естественно, что наблюдаемые проявления этих процессов также весьма разнообразны — это радио- и рентгеновские пульсары, вспыхивающие рентгеновские источники,  $\gamma$ -источники, рентгеновские транзиенты, магнитары и т. п. [7, 9, 10].

Нейтронные звезды являются самыми маленькими наблюдаемыми звездами в Галактике [11]. Их радиусы составляют величину порядка 10 км, что в  $10^5$  меньше размеров обычных звезд. Однако массы нейтронных звезд  $M$  имеют порядок массы Солнца  $M_{\odot}$ , группируясь около значения  $1,4M_{\odot}$ . Средняя плотность вещества нейтронных звезд  $\bar{\rho} = 3M/4\pi R^3 = 7 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>, превышая стандартную ядерную плотность,  $\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>, в несколько раз. Поэтому нейтронную звезду условно можно представить как громадное атомное ядро размером в 10 км. В центре звезды плотность может достигать значений, превышающих ядерную плотность в 10–20 раз. При таких плотностях в центре нейтронной звезды возможна конденсация пионов, гиперонов и каонов. Обсуждается также возможность образования странных кварков.

Тело звезды состоит из коры — внешней и внутренней, — в которой происходит нейтронизация вещества, и ядра — тоже внешнего и внутреннего. Количество протонов и электронов во внутренней коре и внешнем ядре составляет несколько процентов от количества нейтронов. Гравитационная энергия нейтронной звезды составляет заметную долю ( $0,2Mc^2$ ) от энергии покоя звезды.

Существование нейтронных звезд было предсказано Бааде и Цвикки [12] в 1934 г., через два года после открытия нейтронов. Несмотря на малые

размеры, нейтронные звезды являются одними из самых активных звезд, они излучают энергию во всем диапазоне электромагнитных волн — от радиоволн до фотонов сверхвысоких энергий, больших 1 ТэВ. Быстро вращающиеся нейтронные звезды теряют большую энергию. Так пульсар в Крабовидной туманности излучает энергию  $10^{38}$  эрг/с, что на много порядков превышает энергию излучения Солнца. Энергия, излучаемая в радиодиапазоне, составляет лишь малую долю,  $10^{-5}$ – $10^{-6}$  теряемой энергии. Самые мощные радиопульсары излучают также и в других диапазонах — оптическом, рентгеновском,  $\gamma$ -диапазоне.

Нейтронные звезды, связываемые с короткопериодическими источниками излучения — пульсарами, открытыми в 1967–69 годах, представляют собой заключительную стадию эволюции обычных звезд с  $M > 8 M_{\odot}$ , когда гравитационные силы сжимают вещество до ядерных плотностей и происходит образование нейтронного вещества [6, 7, 13]. Нейтронные звезды существуют благодаря возникающему, вследствие принципа Паули, взаимному отталкиванию, но не между электронами, а между нейтронами и протонами.

Кроме радиопульсаров, нейтронные звезды являются также источниками [11] мощного излучения рентгеновского (рентгеновские пульсары),  $\gamma$ - и рентгеновских вспышек (магнитары), постоянного рентгеновского излучения, исходящего из центров остатков взрыва сверхновых, очень слабых оптических звезд. Изучение нейтронных звезд решает и дает возможность решить ряд фундаментальных проблем физики. Это прежде всего исследование уравнения состояния сверхплотного вещества,  $\rho > \rho_0$ .

Принятая сейчас динамика образования нейтронных звезд выглядит следующим образом [1–3]. Термоядерное горение кремния  $^{32}\text{Si}$  с образованием изотопов железа  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{58}\text{Fe}$ ,  $^{60}\text{Fe}$ ,  $^{62}\text{Ni}$  и т. д. замыкает цепочку термоядерных реакций в невырожденном ядре массивной звезды, так как дальше термоядерный синтез возможен только с поглощением энергии. Важным процессом, стимулирующим гравитационный коллапс, является процесс фотодиссоциации ядер железа на 13 альфа-частиц,  $\gamma + {}^{56}_{26}\text{Fe} \rightarrow 13 {}^4_2\text{He} + 4\text{n}$ , и нейтронизация вещества.

Помимо атомного ядра, входящие в его состав частицы (протоны и нейтроны) способны образовывать еще одну стабильную систему — нейтронное вещество [6, 13]. Оно состоит в основном из нейтронов, с малой примесью (порядка нескольких процентов) протонов и, в том же числе, электронов. Благодаря принципу Паули, нейтронное вещество стабильно относительно распада нейтрона по схеме  $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$ , так как энергетический уровень электрона, который мог бы испуститься при распаде, уже занят другими электронами, входящими в состав вещества.

Нейтронное вещество образуется при сверхсильном сжатии обычного вещества, состоящего из электронов и ядер, которое возникает при гравитационном коллапсе звезды, проходящей стадию вспышки Сверхновой. При таком сжатии, когда плотность вещества достигает величин порядка  $10^{11}$  г/см<sup>3</sup>, она, а значит, и энергия электронов становится настолько большой, что начинает идти процесс обратного  $\beta$ -распада,  $p + e^- \rightarrow n + \bar{\nu}$ , — энергии электрона хватает, чтобы превзойти разность масс нейтрона и протона. В итоге с уве-

личением сжатия происходит нарастающий процесс захвата ядрами электронов с превращением протонов в нейтроны. Нейтронные уровни энергии внутри ядра оказываются заполненными, и следующие нейтроны переходят в непрерывный спектр, образуя нейтронную ферми-жидкость. В результате при плотности ненамного меньше ядерной и возникает состояние нейтронного вещества, заполняющего внутреннюю часть нейтронных звезд — пульсаров.

Специфическая особенность нейтронных звезд — их сверхвысокая (сверхъядерная) плотность. Однако в отличие от атомного ядра, в котором нуклоны удерживаются сильным взаимодействием (кварки), в нейтронной звезде нуклоны удерживаются гравитационными силами, а  $\beta$ -распад нейтрона подавлен сильным вырождением электронов сжатого вещества.

При нейтронизации упругость вырожденного вещества уменьшается [7], так как уменьшается концентрация электронов, при сохранении плотности барионов вещество становится «мягче». Рост давления с плотностью замедляется, и эффективный показатель адиабаты вещества,  $\gamma = d \log p / d \log \rho$ , уменьшается с 5/3 до 4/3, приводя, в соответствии с теоремой вириала, к нарушению механической устойчивости объекта [7]. Поэтому нейтронизация вещества является одним из основных физических процессов, вызывающих коллапс ядер массивных звезд на поздних стадиях их эволюции.

Процесс нейтронизации вещества чрезвычайно трудно моделировать в лабораториях даже с использованием сверхвысокого сжатия в лазерных термоядерных мишенях, хотя возможно удастся использовать эквивалентный ему процесс поглощения электронных антинейтрино от, скажем, мощных источников с реакторным стронцием [14].

Дополнительная причина потери гидростатической устойчивости звезды вызвана эффектами общей теории относительности: когда давление вещества дает вклад в силу притяжения, приводя к увеличению силы, стремящейся сжать вещество [6, 13]. При этом коллапс ядра массивной звезды сопровождается вспышкой сверхновой типов II или Ib/c.

При нейтронизации вещества звезда очень быстро теряет устойчивость: потеря упругости приводит к сжатию и нагреву, но отрицательная теплоемкость обычных звезд здесь перестает срабатывать, так как давление вырожденного газа, противодействующее сжатию, слабо зависит от температуры. К тому же большая часть энергии, выделяющейся при гравитационном сжатии, уносится нейтрино, образующимися при нейтронизации. И даже если рост температуры при коллапсе снимает вырождение и поднимает давление электронного газа, энергия продолжает уноситься антинейтрино в ходе процессов бета-распадов перегруженных нейтронами ядер.

Коллапс ядра звезды останавливается при плотностях порядка плотности атомного ядра, при которых существенными становятся эффекты вырождения нейтронов и сжимаемость вещества становится способной противостоять действию сил тяготения. При массе нейтронной звезды от 1 до 2 масс Солнца, ее радиус составляет приблизительно 10–15 км. Свободно падающие внешние слои звезды, ударяясь о жестко сжавшееся ядро, «отскакивают» от него, что, как предполагалось, может быть причиной сброса оболочки и наблюдаемого эффекта сверхновой звезды. Но численное моделирование показало, что такая причина недостаточна для взрыва оболочки сверхновой. Сейчас общеприня-

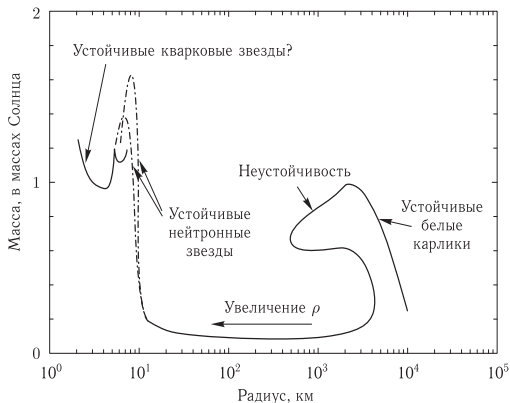
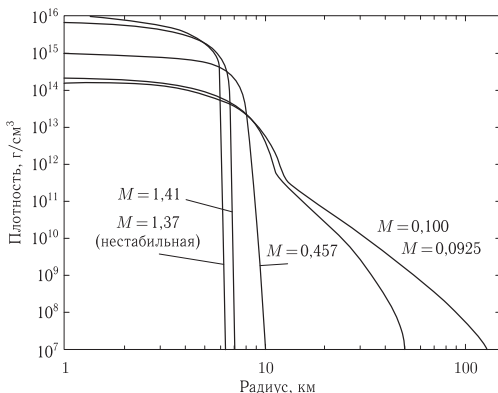


Рис. 11.4. Переход к нейтронным и кварковым звездам [4]

Рис. 11.5. Распределение плотности нейтронных звезд для различных масс (в единицах массы Солнца  $M_{\odot}$ ) [19]

то, что причиной взрыва являются некоторые неоднородные эффекты, как то: магнитное поле, сверхзвуковая конвекция, вращение ядра звезды и т. п. [15–18].

Трансформация звезд от плотных белых карликов к сверхплотным нейтронным и кварковым звездам показывает (рис. 11.4), что при этом возникает стадия неустойчивости. В итоге образуется компактная звезда с  $M \approx M_{\odot}$ ,

размером всего порядка 10 км (рис. 11.5), начальной температурой порядка  $10^{11}$  К, плотностью ядра  $\rho \approx 1,5-15\rho_0$ , и обладающая мощными магнитным ( $B \approx 10^{11}-10^{16}$  Гс) и гравитационным (ускорение  $\approx (1-3) \cdot 10^{14}$  см/с<sup>2</sup>) полями, что делает необходимым использование для ее описания общей теории относительности. Вращающиеся с периодом  $10^{-3}-10$  с нейтронные звезды (радиопульсары) представляют собой единственные астрофизические объекты, в которых механизм замедления вращения (а значит, и эволюция) определяется электродинамическими силами. Нейтронные звезды, входящие в состав двойных систем, проявляются как компактные рентгеновские источники [7].

Несмотря на малые размеры, спектр состояний вещества (рис. 11.6) и физические процессы (рис. 11.6, 11.7) в нейтронной звезде чрезвычайно разнообразны. Ввиду сильной гравитации атмосфера нейтронной звезды имеет толщину от десятков сантиметров до нескольких миллиметров, плотность от  $10^{-2}$  до  $10^3$  г/см<sup>3</sup>; она состоит из неидеальной плазмы с  $T \approx 10^5-10^7$  К и имеет гигантское магнитное поле ( $B \approx 10^{15}$  Гс).

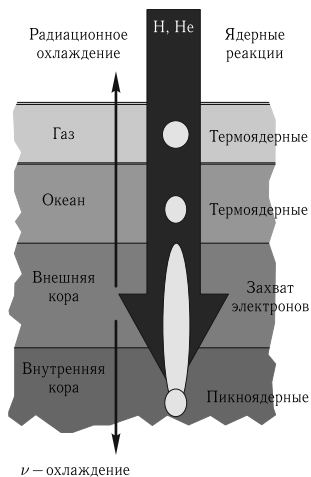
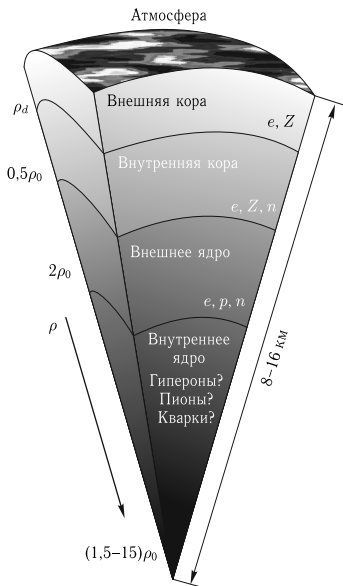


Рис. 11.6. Схематический разрез нейтронной звезды с массой  $1,4 M_{\odot}$ . Параметры звезды сильно зависят от уравнения состояния ее слоев [7, 8];  $\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>

Рис. 11.7. Физические процессы в нейтронной звезде

Атмосфера может состоять из элементов группы железа, сформированной на стадии рождения звезды, или из легких элементов типа водорода и гелия, в результате их аккреции. Если температура звезды не слишком высока, то в коре могут образовываться легкие атомы, молекулы, капли и кластеры металлов. В случае сильного магнитного поля кора может быть конденсированной с малым количеством газа над ней. Сверхсильные магнитные поля могут приводить к квантовым электродинамическим эффектам (типа поляризации вакуума), важным для излучательных процессов. Все эти эффекты очень затрудняют расчет состава, оптических свойств атмосферы и, следовательно, излучательных свойств самой звезды и поэтому представляют большой интерес для теоретической астрофизики физики неидеальной плазмы и ядерной физики [8–10].

Внешняя кора толщиной в сотни метров [3, 9] состоит из плотной плазмы, электроны которой по мере движения вглубь переходят из бoльцмановского в вырожденное состояние, а затем (при  $\rho \gg 10^6$  г/см<sup>3</sup>) и в вырожденный релятивистский газ. При  $\rho \geq 10^4$  г/см<sup>3</sup> происходит полная ионизация плазмы давлением. При дальнейшем сжатии происходит  $\beta$ -захват и нейтронизация вещества.

На границе с ядром нейтронной звезды атомные ядра исчезают, а нейтроны во внутренней коре могут быть сверхтекучими, что отражается на динамике охлаждения и на нейтронной светимости объекта. Сверхтекучесть нейтронного вещества можно наблюдать при сбоях вращения звезды в процессе торможения. В ряде случаев динамика сбоя хорошо объясняется отрывом сверхтекучего вихря от коры звезды. Эволюция магнитного поля, «вмороженного» в звезду, позволяет делать выводы о сверхпроводимости ядра звезды. Так как внутренняя температура звезды сильно зависит от критической температуры перехода нуклонов в сверхтекучее состояние, то предложено [20] использовать нейтронную звезду как «термометр» для измерения критической температур нуклонов в несимметричной ядерной материи, что даст косвенную информацию об уравнении состояния ядерного вещества.

Состав внутреннего ядра нейтронной звезды точно не известен из-за недостаточного знания физики сильных взаимодействий в сверхплотном веществе [6, 7]. Возможно, ядро состоит из нуклонно-гиперонного вещества пионного конденсата, кварк-глюонной плазмы или каких-либо иных экзотических состояний. Если свойства коры ( $\rho < 0,5\rho_0$ ) нейтронной звезды описываются моделями неидеальной плазмы, то при  $\rho \geq \rho_0$  описание свойств вещества крайне затруднено неполнотой лабораторных данных и отсутствием законченной теории вещества сверхядерной плотности [21].

Многие нейтронные звезды, входя в состав двойных систем и при перетекании вещества на нейтронную звезду с сильным магнитным ( $> 10^{10}$  Гс) полем, проявляются как рентгеновские пульсары. При меньших магнитных полях вещество накапливается на поверхности звезды и по достижении некоторого критического значения происходит термоядерный взрыв, что проявляется в виде регулярных рентгеновских барстеров [111]. В отличие от взрывов на поверхности белого карлика, мощное гравитационное поле нейтронной звезды не дает продуктам взрыва отделиться от нее и возвращает их обратно.

Необычным является строение вещества при сильных магнитных полях, присущих нейтронным звездам,  $B > 10^{12}$  Гс [11]. При таких полях циклотронный радиус атомных электронов меньше боровского радиуса, атом сильно сжат в направлении, перпендикулярном магнитному полю, и имеет вид иглы. О том, каковы свойства вещества, образованного такими атомами, можно судить по взаимодействию поверхности нейтронной звезды, на которой плотность вещества достигает  $10^5$  г/см<sup>3</sup>, с ее магнитосферой.

И наконец, изучение активных нейтронных звезд позволяет исследовать электродинамические процессы, происходящие в сверхсильных магнитных полях,  $B > 10^{12}$  Гс, которыми обладают нейтронные звезды.

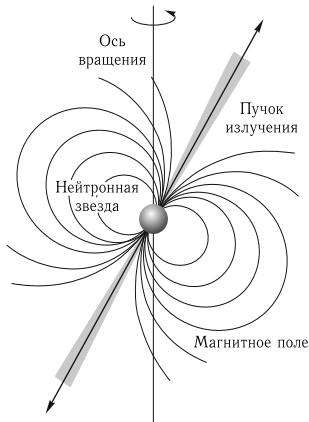


Рис. 11.8. Нейтронная звезда с магнитосферой. Показаны линии индукции магнитного поля нейтронной звезды, ось магнитного диполя которой наклонена к оси вращения. Пульсарное излучение в одной из моделей выходит в виде двух пучков (конусы на рисунке), соосных с магнитным диполем [22]

При наличии очень сильного магнитного поля нейтронной звезды ( $\gtrsim 10^{12}$  Гс) в тесной двойной звездной системе возможен специфический вид аккреции на нейтронную звезду, при котором вещество нормальной звезды с вмороженным в него магнитным полем падает вдоль линий индукции магнитного поля в область магнитных полюсов. Избыток момента импульса при этом передается звезде через магнитное поле, а не в результате гидродинамического движения. Скорости падения на поверхность нейтронной звезды оказываются порядка сотен тысяч км/с, и на небольшие (сотни квадратных метров) полярные области поверхности нейтронной звезды обрушивается колоссальный поток вещества и энергии, генерируя температуру плазмы порядка  $10^9$ – $10^{10}$  К. Выделяющаяся энергия излучается в форме жестких квантов, выходящих из двух горячих «рентгеновских» пятен (рис. 11.8). Сильное магнитное поле делает излучение этих пятен неизотропным.

Поскольку магнитная ось в общем случае не совпадает с осью механического вращения, за время одного оборота нейтронной звезды вокруг оси наблюдатель будет регистрировать один или два импульса рентгеновского излучения. Такие источники носят название *рентгеновских пульсаров* [7] (рис. 11.8).

Предельной индукцией магнитного поля, которой может обладать нейтронная звезда, является значение  $B \approx 10^{18}$  Гс, при котором энергия магнитного поля сравнима с гравитационной энергией [107, 108, 110].

Наблюдения показывают [11], что энергия, теряемая вращающейся нейтронной звездой-радиопульсаром, в основном тратится на образование потока релятивистских частиц, который называют пульсарным ветром. Поток таких частиц составляет  $10^{40}$  частиц в 1 с.

Как упоминалось ранее, существуют нейтронные звезды, образующие целый класс, немногочисленный, но очень активный, которые дают яркие вспышки гамма- и рентгеновского излучения и у которых магнитное поле значительно больше, чем у пульсаров.

Такие звезды (магнитары) сравнительно медленно вращаются, период  $P \approx 5-10$  с, но тормозятся значительно сильнее, чем пульсары,  $dP/dt \approx \approx 10^{-10}-10^{-12}$  с/с. Поток рентгеновского излучения от такой звезды,  $W_x \approx \approx 10^{35}-10^{36}$  эрг/с, значительно превышает теряемую звездой энергию вращения. Энергия, запасенная в магнитном поле, также больше энергии вращения звезды. Это указывает на то, что источником активности звезды, является не вращение звезды, как в случае радиопульсаров, а магнитное поле. Поэтому такие нейтронные звезды называют магнитарами [24].

Сильное магнитное поле в магнитосфере нейтронной звезды создает условия для генерации плазмы и образования ветра — потока релятивистских электронов и позитронов, излучаемого активными звездами.

Как мы увидим в следующей главе, кварк-глюонная плазма является экзотическим сверхплотным состоянием вещества. Такая плазма недавно открыта в лаборатории, она состоит из кварков, антикварков и глюонов [25–28]. Кварк-глюонная плазма обладает максимальной плотностью и может возникать в центре нейтронных звезд или при коллапсе обычных звезд (рис. 11.9). В этом случае говорят о кварковых звездах и гибридных звездах, состоящих из кварк-глюонной материи в центре и адронной оболочки [29]. При этом кварковые звезды должны иметь меньший размер по сравнению с нейтронными из-за большей сжимаемости кварк-глюонной плазмы (рис. 11.10).

Важной особенностью релятивистских астрофизических объектов является наличие гигантских магнитных полей, во многом определяющих динамику их движения и излучательные характеристики.

Регистрируемое излучение нейтронной звезды является в основном мягким рентгеновским. В последнее время зарегистрирован новый класс нейтронных звезд — магнитаров, обладающих сверхмощным магнитным полем до  $10^{15}$  Гс, которое влияет на их гамма-излучение, формируемое вместе с тепловым излучением поверхности [7, 23, 24, 30]. Примером такого объекта может служить самая яркая в нашей галактике из зарегистрированных до сих пор гамма-вспышек, источником которой является нейтронная звезда SGR 1806-20, относящаяся к классу магнитаров и находящаяся на расстоянии примерно 50 000 световых лет от Земли [31]. Длительность вспышки была всего около 0,1 с; в течение нескольких секунд после этого выделилось больше энергии, чем испустило наше Солнце за 250 тысяч лет.

В магнитарах происходят сильнейшие магнитные всплески, при этом поверхность звезды под действием силы Лоренца трескается, и из этих трещин вылетают протоны, которые, взаимодействуя с магнитным полем, излучают энергию. По величине этой энергии определяют магнитное поле

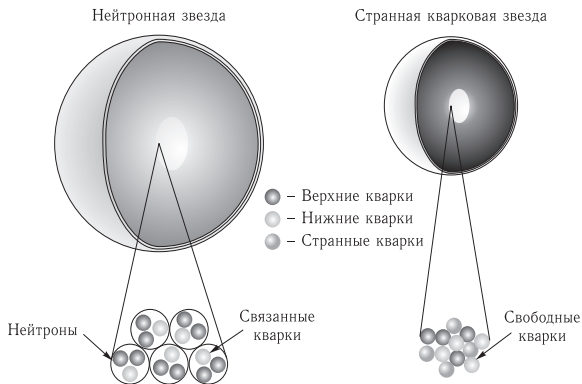


Рис. 11.9. Нейтронные и кварковые звезды

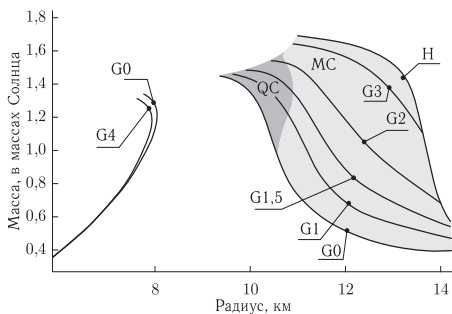


Рис. 11.10. Размеры кварковых и гибридных звезд [29]

звезды [30, 31]. В работе [23] предлагается следующая модель магнитной вспышки магнитара.

Большую часть времени магнитар спокоен, но вызванные магнитным полем напряжения в его твердой коре постепенно нарастают (фаза 1 на рис. 11.11). В определенный момент напряжения в коре превышают предел ее прочности, и она разламывается на множество мелких кусков (фаза 2). Это «звездотрясение» порождает пульсирующий электрический ток, который быстро затухает, оставляя после себя раскаленный плазменный шар (фаза 3). Плазменный шар охлаждается, испуская со своей поверхности рентгеновские лучи, и за считанные секунды испаряется (фаза 4).

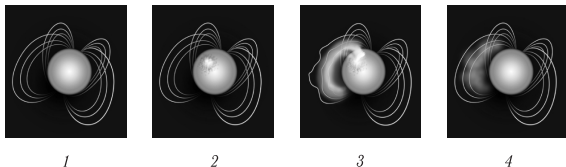


Рис. 11.11. Возникновение вспышки магнитара [23]

Крайне малая длительность вспышки свидетельствует в пользу того, что источником ее энергии является диссипация магнитного поля, запасенного в магнитосфере, а не в коре нейтронной звезды [32]. Возникающее потом расширение «магнитного облака» с малым количеством барионного компонента (с  $M < E/c^2$ ) определяется магнитным полем. Оно является сильно релятивистским и анизотропным, сохраняя эти свои свойства в течение нескольких недель после вспышки.

## 11.2. Сжатие. Ядерные структуры

Двигаясь вправо по шкале ядерных плотностей на рис. 1.13 при  $\rho \gtrsim 10^{10}$  г/см<sup>3</sup> [3, 33, 34] ядра становятся неустойчивыми по отношению к  $\beta$ -распаду с максимальным избытком нейтронов:  $\delta \approx (N - Z)/A \sim 0,3$ , где  $N$ ,  $Z$ ,  $A$ , число нейтронов, протонов и нуклонов, соответственно. С ростом сжатия нейтронный избыток  $\delta$  растет и при  $\delta > 3$  нейтронные уровни энергий перестают быть связанными. Ядра оказываются погруженными в среду свободных нейтронов и не могут в этих условиях существовать, распадаясь с испусканием нейтронов за время  $t \approx 10^{-20}$  с.

Наши сведения о такой материи при  $10^{11}$  г/см<sup>3</sup>  $\lesssim \rho \lesssim 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> и  $0,3 \lesssim \delta \lesssim 0,8$  основываются только на теоретических построениях, частично подкрепленных астрономическими наблюдениями нейтронных звезд, — экзотических и наиболее экстремальных астрономических объектов, возникающих при гравитационном коллапсе ряда звезд на финальных стадиях их эволюции. Однако и возможность теории многочастичных ядерных систем в этой области достаточно ограничены, как и эксперимента, особенно в областях плотности  $\rho < \rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>, характерной для симметричной ядерной материи. Эти процессы нейтронизации вещества являются основой расчета структуры и динамики нейтронных звезд [3], для описания термодинамики которых развиты весьма совершенные модели, обобщенные в отличной монографии [3]. Мы будем следовать этой работе.

В рассматриваемом диапазоне плотностей характерное расстояние между ядрами сравнимо с их размером, что соответствует «ядерным» плотностям плазмы,  $\rho \approx 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. Для описания этих сверхсжатых ситуаций используются три модели [3]. Это расчеты методом Хартри–Фока с эффективным потенциалом взаимодействия нуклонов [35, 42], расчеты Томаса–Ферми при конечных температурах [36, 37], расчеты по капельной модели [38].

В работе [39] рассчитана термодинамика ядерной материи в условиях близких к началу нейтронизации. Это позволило рассчитать свойства нейтронно-избыточных ядер при различных плотностях. Максимальная плотность, при которой существует ядро  $^{84}\text{Se}$  ( $Z/A \approx 0,405$ ), составила  $8,2 \times 10^9 \text{ г/см}^3$ . Сейчас открыто много нейтронно-избыточных ядер и ряд новых структур, устойчивых при больших сжатиях [3].

Развитыми сейчас теоретическими методами удается рассчитать состав и энергию ряда ядерных структур, равновесные из которых называются «холодным катализированным веществом».

Расчеты показывают [3], что минимальное значение  $E$  реализуется на ОЦК-решетке  $^{56}\text{Fe}$  и составляет 930,4 МэВ. Это соответствует  $\rho \approx 7,86 \text{ г/см}^3$ ,  $n_b = 4,73 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$ . Заметим, что ядро  $^{56}\text{Fe}$  не является наиболее сильно связанным свободным ядром. Максимальная энергия связи на нуклон,  $b = [(A - Z)m_n c^2 + Zm_p c^2 - M(A, Z)c^2]/A$ , достигается на  $^{62}\text{Ni}$ , значение  $b(^{62}\text{Ni}) = 8,7945 \text{ МэВ}$ , у  $^{56}\text{Fe}$  значение  $b(^{56}\text{Fe}) = 8,7902 \text{ МэВ}$ , а  $b(^{58}\text{Fe}) = 8,7921 \text{ МэВ}$ .

Энергия ОЦК-решетки  $^{56}\text{Fe}$  остается основным состоянием холодного вещества до давлений  $10^{30} \text{ дин/см}^2$  и  $\rho \approx 10^6 \text{ г/см}^3$  [40]. В этих условиях вещество представляет собой плазму, для которой применима модель однокомпонентной плазмы (ОКП) (см. гл. 4, 10).

При  $\rho \gg 10^9 \text{ г/см}^3$  электроны ультрарелятивистские и  $\mu_e \sim p^{1/4}$ . С ростом давления  $p$  энергетически выгодной становится замена  $(A, Z)$  на  $(A', Z')$  с большей энергией ядер  $W_N$ , но меньшим  $A'/Z'$ , так как рост  $W_N/A$  больше, чем уменьшение  $Z\mu_e/A$ . Это объясняет эффект нейтронизации вещества при больших его сжатиях [3, 33, 34].

Для скачка плотности при нейтронизации [33, 34] справедливо [3]:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \approx \frac{\Delta n_b}{n_b} \approx \frac{Z A'}{A Z'} - 1. \quad (11.1)$$

Равновесные параметры ядер в холодной плотной материи приведены в табл. 11.1 из [41], где представлены максимальные плотности, при которых данные ядра еще существуют,  $\mu_e$  — химпотенциал при этой плотности.

Превращение ядра в следующее ядро вызывает фазовый переход первого рода со скачком плотности  $\Delta\rho/\rho$ , приведенным в последней колонке табл. 11.1

Последняя ее строчка перед горизонтальной чертой соответствует наибольшей плотности, при которой основное состояние материи содержит ядра с массами, измеренными в лаборатории. Последняя строчка в табл. 11.1 соответствует точке просачивания нейтронов из ядра [3]:  $\rho_{\text{ND}} \approx 4,32 \cdot 10^{11} \text{ г/см}^3$ .

Как мы уже отмечали, для описания нейтронной материи при  $\rho \lesssim 10^{14} \text{ г/см}^3$  используются методы расчета свойств атомных ядер в обычных (лабораторных) условиях. Это методы Хартри–Фока при заданном потенциале взаимодействия нейтрон–нейтрон, квазиклассическое приближение Томаса–Ферми и капельная модель сжимаемой жидкости.

Эти расчеты показывают, что по мере сжатия число нейтронов вне атомного ядра возрастает, а число протонов внутри его уменьшается.

Таблица 11.1. Ядра в основном состоянии холодной плотной материи [41]. Верхняя часть получается с экспериментально измеренной массой ядер. Нижняя часть: из массовой формулы Мёллера [110]. Последняя строка соответствует точке просачивания нейтронов из ядра

Element	Z	N	Z/A	$\rho_{\max}$ (г/см <sup>3</sup> )	$\mu_e$ (МэВ)	$\Delta\rho/\rho$ (%)
<sup>56</sup> Fe	26	30	0,4643	$7,96 \cdot 10^6$	0,95	2,9
<sup>62</sup> Ni	28	34	0,4516	$2,71 \cdot 10^8$	2,61	3,1
<sup>64</sup> Ni	28	36	0,4375	$1,30 \cdot 10^9$	4,31	3,1
<sup>66</sup> Ni	28	38	0,4242	$1,48 \cdot 10^9$	4,45	2,0
<sup>86</sup> Kr	36	50	0,4186	$3,12 \cdot 10^9$	5,66	3,3
<sup>84</sup> Se	34	50	0,4048	$1,10 \cdot 10^{10}$	8,49	3,6
<sup>82</sup> Ge	32	50	0,3902	$2,80 \cdot 10^{10}$	11,4	3,9
<sup>80</sup> Zn	30	50	0,3750	$5,44 \cdot 10^{10}$	14,1	4,3
<sup>78</sup> Ni	28	50	0,3590	$9,64 \cdot 10^{10}$	16,8	4,0
<sup>126</sup> Ru	44	82	0,3492	$1,29 \cdot 10^{11}$	18,3	3,0
<sup>124</sup> Mo	42	82	0,3387	$1,88 \cdot 10^{11}$	20,6	3,2
<sup>122</sup> Zr	40	82	0,3279	$2,67 \cdot 10^{11}$	22,9	3,4
<sup>120</sup> Sr	38	82	0,3167	$3,79 \cdot 10^{11}$	25,4	3,6
<sup>118</sup> Kr	36	82	0,3051	$(4,32 \cdot 10^{11})$	(26,2)	

Результаты подобных расчетов были обобщены [3] в виде аналитических формул, удобных для расчета уравнения состояния внутренней части коры нейтронных звезд.

### 11.3. Модель Томаса–Ферми

В режиме нейтронного просачивания (neutron drip) число нуклонов в элементарной ячейке быстро растет со сжатием и при  $\rho \approx 10^{13}$  г/см<sup>3</sup> может достигать  $A_{\text{cell}} \approx 1000$  [42]. Это сильно осложняет применение метода Хартри–Фока, так как и в случае расчета атомных структур (см. гл. 3, 7) резко увеличивает объем необходимых вычислений (см. проблему «экспоненциального» барьера Кона [43]). С другой стороны, увеличение числа нуклонов в элементарной ячейке оправдывает применение более упрощенного квазиклассического приближения (гл. 6).

Многочисленные расчеты по этой модели (см. подробнее [3]) дали просачивание нейтронов при  $\rho_{\text{ND}} \approx 4 \cdot 10^{11}$  г/см<sup>3</sup>. Значение  $Z$  остается почти неизменным,  $Z \approx 30$  для  $10^{11}$  г/см<sup>3</sup>  $\leq \rho \leq 5 \cdot 10^{13}$  г/см<sup>3</sup>, и затем уменьшается до  $Z \approx 20$  при  $\rho \approx 10^{17}$  г/см<sup>3</sup> [44].

Капельная модель [3] исходит из выделения объемных  $E_{e,\text{bulk}}$  и поверхностных  $E_{C,\text{surf}}$  частей полной энергии:

$$E_{\text{cell}} = E_{N,\text{bulk}} + E_{N,\text{surf}} + E_{\text{Coul}} + E_e. \quad (11.2)$$

где второй и третий члены зависят от размера и формы ядра. Нуклоны затем разделяются на три подсистемы: нейтронную объемную жидкость «i», менее плотную жидкость «o» и поверхностную жидкость на границе «i-o»,

обозначаемую «s». Вся система находится в механическом и «химическом» равновесии. Внутри ядра в фазе «i» плотности нуклонов  $n_{p,i}$ ,  $n_{n,i}$  постоянны, а  $n_{n,i}$  и  $n_{p,i} = 0$  в фазе «o». Сам размер ядра можно определить через радиус протона  $r_p$  так, что  $(4\pi r_p^3 n_{p,i})/3 = Z$ .

Равновесное значение параметров находится минимизацией  $E = E_{\text{cell}}/V_c$  при заданном  $n_b$ . При этом учитываются условия химического и механического равновесия (см. подробней [3]), дающие 7 независимых переменных, от которых зависит  $E$ . Капельная модель была объектом многочисленных исследований, модификаций и уточнений (см. обсуждение в [3]). Расчеты по одному из наиболее современных вариантов этой модели [45] применительно к условиям нижней части коры нейтронной звезды показывают, что число нуклонов в ядре растет с плотностью и достигает  $A \approx 300$  при  $\rho \approx 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> при  $A_{\text{cell}} \approx 1000$ . При этом число протонов меняется очень слабо,  $Z \approx 40$ . Сферические ядра при  $\rho \approx 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> оказываются весьма тяжелыми и нейтронно избыточными, что ставит вопрос об их стабильности по отношению к их деформациям и делению.

Из сделанных расчетов [3] следует, что при  $\rho < 10^{13.5}$  г/см<sup>3</sup> основное состояние ядерной материи состоит из сферических ядер, которые устойчивы относительно перехода в структуры иной формы, фрагменты либо в *pre*-газ. Сферичность формы ядер в этой  $r_p \ll r_c$  области следует, например, из капельной модели, которая минимизирует сферическую форму из-за вклада  $E_{N,\text{surf}} + E_{\text{Coul}}$  для  $r_p \ll r_c$ . Ситуация, по-видимому, меняется при  $\rho > 10^{13.5}$  г/см<sup>3</sup>, где  $r_p/r_c > 0,5$ .

Экзотические формы ядер возникают [46], когда объем ядер начинает превосходить  $\approx 50\%$  полного объема системы и ядерная материя со сферическим нейтронным «пузырем» становится энергетически выгодной.

Исторически первые работы этого рода были выполнены при расчетах гравитационных коллапсов массивных звезд, где было показано, что при  $T \gtrsim 10^{10}$  К и энтропии  $(1-2)k_B$  перед переходом к состоянию однородной плазмы возникает серия фазовых переходов, сопровождающихся изменением формы ядер. Были рассмотрены сферические ядра в газе нуклонов (3N), а также сферические «пузыри» (3B) в плотной ядерной материи. При определенной плотности могут стать энергетически выгодными двумерные структуры, образованные ядерными цилиндрами (2N) и полыми цилиндрами (2B) в ядерном газе, или одномерные, образованные параллельными слоями ядерной материи, разделенной нуклонным газом 1N. Было установлено, что с ростом плотности происходит трансформация  $3N \rightarrow 2N \rightarrow 1N \rightarrow 2B \rightarrow 3B$  с последующим переходом к однородной материи. Эти переходы идут в направлении увеличения доли более плотной (ядерной) фазы.

В работе [46] было показано, что положение и само существование экзотических ядерных структур зависит от вида потенциала N–N-взаимодействия. Показано, что переходы  $3N \rightarrow 2N \rightarrow 1N \rightarrow 2B \rightarrow 3B$  начинаются при  $n \approx 0,064$  фм<sup>-3</sup>  $\approx \frac{1}{3}n_0$ , ( $\rho \approx 1,1 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>) и кончаются переходом от фазы 3B в однородное *pre*-вещество при  $n_{cc} \approx 0,096$  фм<sup>-3</sup>;  $\rho_{cc} \approx 1,6 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. Разница между значениями энергии  $E(n_b)$  для различных структур весьма мала, порядка или меньше кэВ·фм<sup>-3</sup>.

В работе [47] показано, что диапазон плотностей существования экзотических фаз очень узок,  $(1,0-1,5) \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. В работе [48] получен еще более узкий диапазон концентраций структурных переходов,  $(0,050-0,058)$  фм<sup>-3</sup>.

Вне области экспериментально изученных ядер, УРС ядерного вещества изучено слабо. При  $\rho > \rho_{\text{ND}}$  свойства ядер все сильнее зависят от окружающего нейтронного газа, давление которого растет с ростом полного давления. УРС ядерной материи состоит из гамильтониана нуклонов, описывающего нуклонное взаимодействие при  $\rho \leq 2\rho_0$  (выше по плотности будут важны ненуклонные степени свободы). Для описания вводят эффективный ядерный гамильтониан для области  $(10^{11} < \rho \leq \rho_0)$  г/см<sup>3</sup>. При этом эффективные взаимодействия строятся так, чтобы описать свойства обычных (лабораторных) ядер, так как при  $\rho \geq 10^{13}$  г/см<sup>3</sup> основной вклад в давление дают нейтроны; эффективные ядерные силы дают адекватное описание нейтронного газа субъядерных плотностей. Хотя у нас нет прямой экспериментальной информации о нейтронном веществе, у нас есть надежные численные данные о его свойствах при  $n_n \lesssim n_0$  [49, 50].

Сопоставление двух УРС нейтронного вещества приведено на рис. 11.12 [3]. Видно, что переход к *пре-жидкости* заметно увеличивает наклон кривых: происходит увеличение «жесткости» вещества.

Это увеличение жесткости УРС описывается показателем адиабаты:

$$\gamma = \left(\frac{\rho}{p}\right) \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right),$$

(см. рис. 11.13).

При  $\rho < \rho_{\text{ND}}$  показатель адиабаты  $\gamma$  близок к  $4/3$  [3], так как в этой области давления  $p_e$  ультрарелятивистского электронного газа и решетки  $p_i$  пропорциональны  $\rho^{4/3}$ . Давление выше скачка плотности определяется мягким УРС капельной модели, что понижает  $\gamma$ . После области «кривой устойчивости» УРС становится много жестче с заметным увеличением  $\gamma$  в области  $\rho_{\text{cc}}$ . Затем следует резкое возрастание  $\gamma$ , связанное с исчезновением ядер и появлением *пре-жидкости*.

Мы не будем здесь описывать прочностные свойства ядерного кристалла при  $\rho < \rho_{\text{cc}}$ , которые проанализированы для релятивистского случая в работе [52], а для нерелятивистского в работе [3]. Эти свойства важны для описания коры нейтронных звезд при  $\rho \lesssim 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. При этом рассматриваются ОЦК-решетки и поликристаллические структуры. В [53] в пренебрежении электронным экранированием рассчитаны модули сдвига кулоновской ОЦК-решетки и получено следующее выражение для модуля сдвига:

$$\mu = \frac{1}{5}(2b_{11} + 3c_{44}) = 0,1194 \frac{n_N(Ze)^2}{r_c}, \quad (11.3)$$

В изотропной среде это выражение имеет вид

$$\mu = 0,0159(Z/26)^{2/3} p_e, \quad (11.4)$$

где  $p_e$  — давление ультрарелятивистского электронного газа.

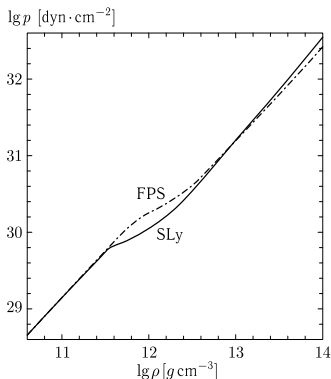


Рис. 11.12. Сравнение УРС SLy и FPS. Из [3], воспроизводится с согласия авторов

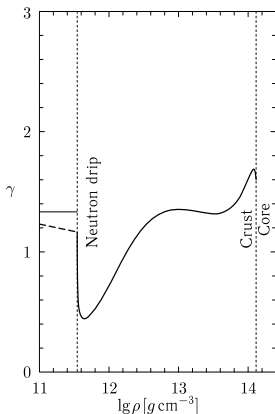


Рис. 11.13. Показатель адиабаты  $\gamma$  для основного состояния вещества нейтронной звезды для модели NP до просачивания и модели CLDM из [45, 51] при более высоких  $\rho$ . Из [3], воспроизводится с согласия авторов

Поэтому

$$\mu/K = 0,016(Z/26)^{2/3}(p_e/\gamma p) \ll 1. \quad (11.5)$$

Коэффициент Пуассона такого кристалла  $\sigma \approx 1/2$ , а модуль Юнга  $E \approx 3\mu$ .

Плазма в магнитном поле является предметом многих исследований в связи с работами по управляемому термоядерному синтезу [2, 54], по магнито-гидродинамическим генераторам и в связи с астрофизическими приложениями [3].

В последнем случае большое внимание уделяется нейтронным звездам, где типичные поля достигают значений  $B \approx 10^{12}$  Гс или для магнитаров  $B \approx 10^{15}$  Гс [2, 54]. В таких полях поперечное магнитному полю движение электронов и ионов квантуется в орбитали Ландау, длиной  $a_m \sim (\hbar c/eB)^{1/2}$ . Отношение боровского радиуса  $a_0$  к этой длине есть параметр интенсивности поля  $\gamma = (a_0/a_m)$ . При больших  $\gamma$  действующая на валентные электроны атома сила Лоренца превосходит кулоновскую силу. Релятивистские эффекты влияют на энергетические уровни Ландау электронов, если значение  $B$  (в релятивистских единицах) удовлетворяет условию

$$b = \hbar\omega_c/(m_e c^2) = B/B_r \gtrsim 1. \quad (11.6)$$

Здесь  $\omega_c = eB/m_e c^2$  — электронная циклотронная частота,  $B_r = m_e^2 c^3/(e\hbar) \approx 4,4 \cdot 10^{13}$  Гс — релятивистское значение индукции магнитного поля.

Магнитное поле называют сильным при  $\gamma \gg 1$  (радиопульсары) и сверх-сильным при  $b \gtrsim 1$  (магнитары).

Термодинамические функции идеального электронного газа в магнитном поле приведены в работе [3].

Влияние магнитных полей на термодинамику и структуру вещества подробно изложено в работе [112], где приведена исчерпывающая литература и удобные аппроксимационные формулы.

С ростом плотности,  $\rho > \rho_0 \approx 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>, ядерное вещество переходит в новые формы, отличающиеся от хорошо знакомых ядерных структур при нормальных условиях  $\rho_0$  и носящих поэтому название «экзотических» [3]. Существование этих состояний обусловлено особенностями сильного (адронного) взаимодействия (пионная и каонная конденсации), а также кварковой структурой барионов (деконфайнмент кварков).

В изложении следующего параграфа мы будем следовать монографии [3].

### 11.4. Мезонная, пионная и каонная конденсации

Пионы — самые легкие мезоны, и они могут присутствовать в системе как свободные частицы и заменить электроны в конденсате при  $\rho > \rho_0$  [55]. Идея образования пионного конденсата из-за  $\pi N$ -притяжения развивалась в работах [56–59], где отмечены изменение в этом случае симметрии и важная роль ядерных корреляций для существования такого конденсата. Образование пионного конденсата, согласно [3], «смягчает» УРС ядерного вещества.

Каоны являются наиболее легкими странными мезонами и согласно [60] должны образовать конденсат при  $\rho > 3\rho_0$ , ввиду притяжения  $K^-N$ . Каонная конденсация, согласно [3], так же резко «смягчает» УРС.

Кварки являются основными строительными элементами адронов; при достаточно высоких плотностях барионы могут «диссоциировать», образуя кварковое вещество или кварк-глюонную плазму (КГП). Расчеты УРС КГП были выполнены по решеточной модели [61], развитой для квантовой хромодинамики. Свойства и модели КГП мы рассмотрим в следующей главе.

Поскольку, как в газе (гл. 2), сильное  $NN$  взаимодействие можно пред-ставить как сумму короткодействующего отталкивания и длинодействующего притяжения, то в системе возможна кристаллизация. При этом в нейтронной материи возможно образование сложных структур типа чередующихся слоев жидких кристаллов, квазиодномерных нитей и т. п., а каждая из сосуществующих фаз может быть электрически заряжена. Образование кристаллических структур может приводить к проявлению прочностных явлений.

Большая неопределенность в УРС ядерной материи позволила выдвинуть [62] эвристическую гипотезу о том, что возникающие при больших сжатиях экзотические структуры, находящиеся в  $\beta$ -равновесии, будут устойчивы и при нормальных условиях, образуя гипотетические «самосвязанные» состояния [63] или  $Q$ -материю [64]. На основе подобных гипотез строятся современные модели «странных» звезд [2, 3, 54].

Обмен виртуальными пионами ответственен за дальнедействующую компоненту  $NN$ -взаимодействия. Энергия  $\omega_\pi$  и импульс  $k$  пиона не удовлетворяют стандартным формулам,  $\omega_\pi^2 = m_\pi^2 c^2 + k^2 c^2$ . Виртуальность пионов состоит

в том, что они живут время  $\sim \hbar/m_\pi c^2 \approx 5 \cdot 10^{-24}$  с и проходят характерную длину  $\sim \hbar/m_\pi c \approx 1,4$  фм.

Из-за сильного взаимодействия пионов с нуклонами основное состояние плотной ядерной материи должно включать в себя бозе-эйнштейновский конденсат пионов [56–59]. Эта конденсация может быть описана на основе теории ядерной ферми-жидкости [65], либо на языке лагранжиана [58, 59].

В первом из этих методов проводится анализ устойчивости пространственно однородного состояния *прем*-вещества в  $\beta$ -равновесии. Оказывается, [3, 56, 57], что такое состояние при  $\rho \lesssim 0,5\rho_0$  теряет устойчивость по отношению к формированию «периодических ядерных структур» — волн плотности. Рассматривая устойчивость при  $\rho > \rho_0$  были установлены различные ветви возмущений.

Пионная конденсация играет важную роль для расчета эмиссии нейтрино, так как она открывает прямой урка-процесс, запрещенный в нормальном *прем*-веществе условием сохранения импульса.

Расчет УРС *прем*-вещества, в условиях  $\beta$ -равновесия между адронами и лептонами, исходит [3] из минимизации полной плотности энергии,

$$\varepsilon(n_b, n_q^{(h)}, n_e, n_\mu) = \varepsilon(n_b, n_q^{(h)}) + \varepsilon_e(n_e) + \varepsilon_\mu(n_\mu), \quad (11.7)$$

при фиксированной плотности барионов и при условии электронейтральности:

$$n_n + n_p = n_b, \quad n_p + n_{\pi^+} = n_{\pi^-} + n_e + n_\mu. \quad (11.8)$$

Открывающиеся здесь возможности схематично изображены на рис. 11.14. Видно сильное смягчение УРС из-за пионной конденсации, приводящее к  $v_s^2 < 0$  (на участке СВ рис. 11.14 б).

Отметим особо рис. 11.14 в, согласно которому [57, 66] предсказано образование аномальных ядер, значительно более плотных, чем обычные. В аст-

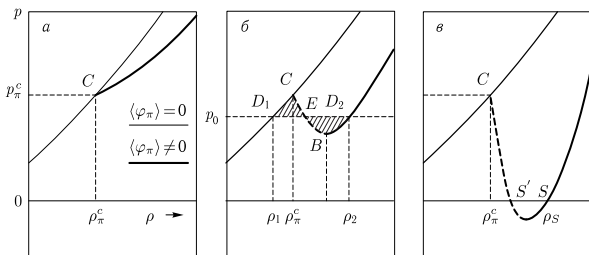


Рис. 11.14. Три качественно различных УРС пион-конденсированных сред. Толстые сплошные линии показывают пион-конденсированные фазы; тонкие сплошные линии относятся к нормальной фазе: а) фазовый переход второго рода с умеренным смягчением; б) сильное смягчение, приводящее к фазовому переходу первого рода при  $p = p_0$ ; в) очень сильное смягчение, ведущее к стабильно «аномальным» сверхплотным самосвязанным состояниям при  $p = 0$  и  $\rho = \rho_s$ . Из [3], воспроизводится с согласия авторов

рофизике это приводит к возможности существования аномальных звезд размером с мячик для гольфа [3, 67].

В случае конечных температур максимум пионной конденсации не меняется. Это сильное  $\pi^-n$ -притяжение, которому противостоит увеличение кинетической энергии из-за упорядочивания состояния конденсата. Увеличение температуры сдвигает конденсацию в сторону больших плотностей [68]. В то же время при  $k_B T \gtrsim 30$  МэВ газ тепловых пионов тоже дает вклад в термодинамику системы. Критическая температура  $T_{cr}^\pi$  пионной конденсации [68, 69] составляет  $k_B T_{cr}^\pi \gtrsim 60$  МэВ.

Каонная конденсация долго рассматривалась как малозначительный процесс из-за большой массы каонов,  $m_K c^2 = 493,6$  МэВ. Условие устойчивости каона  $K^-$  в среде имеет вид

$$\mu_{K^-} = m_K c^2 = \mu_e. \quad (11.9)$$

Каон может занять нижнее энергетическое состояние только при высоких плотностях:

$$n_b > \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{m_K c}{\hbar} \right)^3 \approx 33n_0 \cdot \frac{x_e}{0,1}, \quad (11.10)$$

где  $x_e = n_e/n_b$ .

Из-за сильного взаимодействия каонов с барионами они образуют конденсат при плотности, в несколько раз превосходящей ядерную  $\rho_0$  [3, 70].

В *прем-веществе* каон  $K^-$  может образоваться в результате следующих процессов:



его энергия должна удовлетворять условию  $\omega_K < \mu_e$ . Ядерные опыты при нормальных условиях свидетельствуют о сильном притяжении  $K^-$  с энергией от  $-80$  МэВ до  $-120$  МэВ, и потенциальная яма становится значительно глубже при  $n_b \approx (2-3)n_0$ . Как и в случае пионов, каонная конденсация сильно увеличивает эмиссию нейтрино, вызывая быстрое охлаждение звезд.

Расчет влияния каонного конденсата на УРС ядерного вещества выполняется в рамках модели среднего поля [3]. Для построения соответствующих потенциалов и параметров модели среднего поля используют экспериментальные данные каон-нуклонных столкновений, а также данные кварковой модели адронов и равновесные свойства ядер [70]. В зависимости от интенсивности каон-нуклонного притяжения каонная конденсация может быть переходом первого (при  $U_{K^-} \lesssim -90$  МэВ) или второго ( $U_{K^-} \gtrsim -80$  МэВ) рода.

Оценки границ каонной конденсации дают значения  $n \gtrsim (3-5)n_0$  [71, 72], предсказывают двукратный скачок плотности перехода и сильное «умягчение» УРС.

Влияние температуры на каонную конденсацию исследовано в работах [73, 74], где показано, что при  $T \lesssim 60$  МэВ этот эффект мал и состоит в сдвиге границы конденсации  $\rho_c^K(T) > \rho_c^K(0)$ . Данные по параметрам соответствующих критических точек, по-видимому, отсутствуют [3].

При энергии столкновения тяжелых ядер порядка  $E_{eab} \approx 100$  МэВ/нуклон температуры не достаточно велики для заметной адронизации и возможен эффект,  $CT \lesssim 20$  МэВ, падения давления ниже, чем при нормальной ядер-

ной плотности, что называют переходом «жидкость-газ» в ядерном веществе [75]. Критическая точка такого ядерного фазового перехода соответствует  $T \approx 18$  МэВ и  $\rho \approx 0,4\rho_e$ . Наличие этого перехода может проявляться по особенностям распределения фрагментов при релятивистском столкновении ядер. Детали этого эффекта содержатся в работе [76].

### 11.5. Нуклоны и гипероны при сверхсжатиях

Как мы видели, ядра не могут существовать при плотности  $\rho > (1,5-2) \times 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> и система приходит в квазиоднородную плазму нейтронов, протонов и электронов. Это состояние материи описывается достаточно надежно методами теории многих тел, успешно применяемой для описания структуры ядра. В этом состоянии барионы находятся в  $\beta$ -равновесии с электронами (и мюонами, если электронная энергия Ферми превосходит  $m_\mu c^2 \approx 105,7$  МэВ). Такие состояния нейтронных звезд носят названия «*прем*-материи», и она встречается у нейтронных звезд в так называемом внешнем ядре [3]. При больших плотностях вещество переходит в так называемое гиперонное состояние.

Ввиду того, что речь идет о плотностях, больших обычной ядерной плотности,  $\rho \approx 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup>, наши сведения о таких состояниях материи весьма ограничены, что открывает дорогу разным качественным предположениям. Например, вещество здесь может терять однородность с образованием конденсата пионов и каонов, а также деконфайнмента кварков с образованием кварк-глюонной плазмы (см. гл. 12).

Расчет УРС при  $\rho \gtrsim 10^{14}-10^{15}$  г/см<sup>3</sup> основан на определении основного состояния системы адронов и лептонов и производится путем минимизации свободной при заданной электрическом и барионном зарядах.

Эта крайне трудная физическая проблема, решаемая при почти полном отсутствии экспериментальной информации, — есть только наблюдательные данные по нейтронным звездам [3], взрывам сверхновых [2, 54] и релятивистских ядерных столкновениях.

Приступая к обсуждению УРС ядерной материи, еще раз отметим, что речь идет об описании однородной, изотропной ядерной среды, характерной для астрофизических объектов. В опытах по ядерным столкновениям (см. гл. 12) мы имеем дело с конечной системой нуклонов, для которых условия однородности и термодинамического равновесия должны проверяться отдельно (см. [2, 54]). В этом случае речь идет и о локальном термодинамическом равновесии — приближении, составляющем основу нестационарной газовой динамики.

Вещество при  $\rho \sim \rho_0$  содержит не более 10% протонов и электронов, поэтому, в первом приближении, ими можно пренебречь и считать систему чисто нейтронной. Для такой материи сделано большое количество расчетов УРС (см. [3, 77] и содержащиеся там ссылки), которые при  $\rho \approx 3\rho_0$  страдают большой неопределенностью, так как примерно половина энергии нуклона определяется плохо известными потенциалами нуклонных взаимодействий.

Следующий шаг — расчет УРС для *прем*-вещества в  $\beta$  равновесии — делается на основе результатов асимметричной ядерной материи [3] — однородной

смеси нуклонов [78], а также методами разложений Бракнера–Бете–Голдстоуна (ББГ) [79].

Для описания вклада нуклонов и гиперонов в УРС требуются сведения о соответствующих потенциалах взаимодействия [80] с последующим расчетом их термодинамических свойств, например, методом Хартри–Фока. В расчетах [80] были учтены нуклоны  $\Sigma$ ,  $\Lambda$ ,  $\Xi$ -гипероны и  $\Delta$  резонансы, которые, как выяснилось, присутствуют в системе при  $\rho \gtrsim 1,2 \cdot 10^{15}$  г/см<sup>3</sup>. Отмечена сильная зависимость результатов от вида межчастичного взаимодействия.

Расчеты УРС методами функции Грина [81, 82] и ББГ показали «умягчение» УРС вещества при учете гиперонной подсистемы.

Модели ядерной материи развиваются для расчета УРС однородного и бесконечного ядерного вещества, а также для описания тяжелых много-нуклонных ядер. В первом случае кулоновская энергия для бесконечной системы может быть исключена. В УРС для рассмотренной выше жидкостной модели ядра это осуществляется переходом  $E_{Coul} = 0$  и  $A \rightarrow \infty$ . В этом пределе энергия на нуклон  $E$  зависит только от плотности нейтронов и протонов. Свойства такой системы удобно выразить через плотность нуклонов  $n_b$  и параметр асимметрии  $\delta = (n_n - n_p)/n_b$ . Случай  $\delta = 0$  соответствует симметричной ядерной материи, а  $\delta = 1$  — нейтронной материи. Первый случай является наиболее простым, так как из-за зарядовой симметрии можно рассматривать только один тип частиц — нуклоны. Симметричная материя является хорошим приближением для описания объемных свойств тяжелых ядер, а нейтронная материя — для нейтронных звезд. В первом случае для обычных ядер в земных условиях  $\delta^2 \lesssim 0,04$ .

Расчеты свойств ядерной материи служат материалом для сравнения с многочастичными моделями ядра (см. [79]). Величины  $E$  и  $n_e$  в минимуме кривых (рис. 11.15) обозначают  $E_0$  и  $n_0$ , так что  $B_0 = -E_0$  — максимальная энергия связи на нуклон в ядерной материи. Сопоставление короткодействующего отталкивания и длиннодействующего притяжения определяет «насыщение» в нуклон-нуклонном взаимодействии. Величина  $B_0 = -E_0$  есть энергия связи в насыщении, а  $n_0$  — плотность насыщения.

Рассмотрим случай малых  $\delta$ , типичных для ядер в земных условиях:

$$E(n_b, \delta) \simeq E_0 + S_0 \delta^2 + \frac{K_0}{9} \left( \frac{n_b - n_0}{n_0} \right)^2, \quad (11.12)$$

где  $S_0$  и  $K_0$  — энергия ядерной симметрии и сжимаемости в точке насыщения:

$$S_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2} \right)_{n_b=n_0, \delta=0}, \quad K_0 = 9 \left( n_b^2 \frac{\partial^2 E}{\partial n_b^2} \right)_{n_b=n_0, \delta=0}; \quad (11.13)$$

$S_0$  определяет рост энергии из-за малой асимметрии, а  $K_0$  задает кривую  $E(n_b)$  в точке  $n_b = n_0$  и описывает увеличение энергии с ростом давления. Эти параметры понадобятся нам в главе 13 для построения полуэмпирического УРС ядерного вещества.

Численные значения величин в равновесии определяются из экспериментальных данных по свойствам ядер в нормальных условиях и составляют

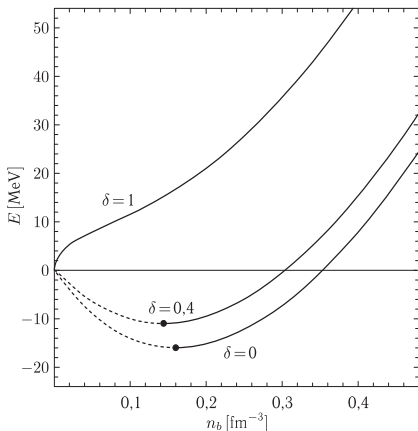


Рис. 11.15. Энергия на нуклон в зависимости от барионной плотности для симметричной ядерной материи ( $\delta = 0$ ), для асимметричной ядерной материи  $\delta = 0,4$  (такая асимметрия соответствует нейтрон-капельной точке в коре нейтронной звезды и в центральном ядре новорожденной протонейтронной звезды), и чисто нейтронной материи ( $\delta = 1$ ). Минимумы кривых  $E(n_b)$  обозначены черными точками. Пунктирные сегменты соответствуют отрицательному давлению. Расчеты выполнены для SLy4-модели эффективного гамильтониана ядра, которая была использована для расчета UPC SLy [51]. Это дает  $n_0 = 0,16 \text{ фм}^{-3}$  и  $E_0 = -16,0 \text{ МэВ}$ . Из [3], воспроизводится с согласия авторов

(с разной степенью точности)  $n_0 = (0,16 \pm 0,01) \text{ фм}^{-3}$ ,  $B_0 = (16,0 \pm 1,0) \text{ МэВ}$ ,  $S_0 = 32 \pm 6 \text{ МэВ}$ ,  $K_0 = (231 \pm 5) \text{ МэВ}$  [3].

Гамильтониан системы должен включать вклады от частиц или взаимодействий. Обычно эти вклады дают методами квантовой хромодинамики (КХД). При этом кулоновский член в гамильтониане пренебрежимо мал, а слабое взаимодействие неявно присутствует в каналах достижения равновесия.

К сожалению, практическая реализация этого формализма встречает серьезные трудности и поэтому применяются упрощенные модели, в которых кварки рассматриваются не отдельно, а как связанные в адроны (барионы и мезоны). Далее в гамильтониан вводится феноменологическая модель сильного (адронного) взаимодействия, основанная на мезонкопических теориях, где сильное адронное взаимодействие описывается моделью обмена мезонов и вводятся соответствующие псевдопотенциалы. Параметры этих псевдопотенциалов находятся на основе многочисленных экспериментов по нуклонным рассеяниям и опытным данным по свойствам дейтерия  $^2\text{H}$ . Опытные данные по NN и NN взаимодействиям ограничиваются гиперонами малых масс  $\Lambda$  и  $\Sigma$ . По другим гиперонам экспериментальная информация еще более ограничена.

Кроме парных, при  $\rho \geq 10^{15}$  г/см<sup>3</sup>, заметный вклад дают трехчастичные и многочастичные взаимодействия, данные по которым очень скудны.

Рассмотрим сначала упрощенную «минималистическую модель» [3], основанную на расширении *прем*-модели на область  $\rho \geq 2\rho_0$ .

Исторически основная задача ядерной физики состояла в нахождении сил, связывающих нуклоны в ядро. Согласно [83], до середины XX века на эту проблему человечество потратило больше времени, чем на все другие научные проблемы вместе взятые. Современные феноменологические потенциалы построены на основе громадного количества экспериментов по нуклон-нуклонному рассеянию в диапазоне энергий до 350 МэВ, выше которой включаются неупругие процессы рождения пионов.

Эффективный потенциал нуклон-нуклонных взаимодействий является сложной и часто громоздкой тензорной функцией пространственных, спиновых и изоспиновых переменных:

$$\hat{v}_{ij} = \sum_{u=1}^{18} v_u(r_{ij}) \hat{O}_{ij}^u, \quad (11.14)$$

где первые 14 операторов зарядонезависимы, т. е. инвариантны относительно вращения в пространстве изоспина:

$$\begin{aligned} \hat{O}_{ij}^{u=1, \dots, 14} = & 1, \tau_i \cdot \tau_j, \sigma_i \cdot \sigma_j, (\sigma_i \cdot \sigma_j)(\tau_i \cdot \tau_j), \hat{S}_{ij}, \hat{S}_{ij}(\tau_i \cdot \tau_j), \\ & \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}(\tau_i \cdot \tau_j), \hat{L}^2, \hat{L}^2(\tau_i \cdot \tau_j), \hat{L}^2(\sigma_i \cdot \sigma_j), \\ & \hat{L}^2(\sigma_i \cdot \sigma_j)(\tau_i \cdot \tau_j), (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})^2, (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}})^2(\tau_i \cdot \tau_j). \end{aligned} \quad (11.15)$$

Даже это (11.14), (11.15) сложное представление имеет ограничение — оно локально и зависит от  $\mathbf{r}_{ij}$ , и не описывает нелокальные члены — например, обмен мезонами.

Трехчастичные взаимодействия начинают играть роль с ростом  $\rho$  и необходимы для описания энергии связи <sup>3</sup>Н и <sup>4</sup>Не. Один из способов его учета [84, 85] состоит в модификации потенциала на средних расстояниях и путем модификации однопионного обмена.

Релятивистские поправки, вызванные переходом от сопутствующей к лабораторным системам координат уменьшают отталкивающую часть потенциала и вносят вклад в УРС при больших плотностях [78].

На адронном уровне сильное нуклон-нуклонное взаимодействие есть результат мезонного обмена между нуклонами. На полевом языке — это результат взаимодействия нуклонного и мезонного полей.

Полной современной теорией сильного взаимодействия является теория квантовой хромодинамики (КХД), где основными полями являются поля кварков и глюонов. В рассматриваемой нами сейчас модели мезонного обмена для сильного взаимодействия, кварки и глюоны прямо не возникают, а вещество строится из мезонов, нуклонов и их резонансов (как  $\Delta$ -изобары). Модель мезонного обмена успешно описывает нуклон-нуклонные взаимодействия, при энергиях  $\lesssim 350$  МэВ, свойства <sup>2</sup>Н и «разбавленных» ядерных систем и оперирует с ядерными и мезонными полями,  $\psi$  и  $\varphi$ . При этом мезоны имеют массу  $\lesssim 1$  ГэВ/с<sup>2</sup>, что не позволяет описать короткодействующие взаимо-

действия при  $\hbar/mc \lesssim 0,2$  фм. Мезон-нуклонное взаимодействие описывают соответствующим членом в лагранжиане, зависящем от свойств симметрии мезонного поля при вращении и отражении. Если говорить о симметрии, то рассматриваются следующие типы мезонов: псевдоскалярный (поле  $\varphi^{\text{ps}}$ , масса  $m_{\text{ps}}$ ), скалярный (поле  $\varphi^{(s)}$ , масса  $m_s$ ) и векторный (поле  $\varphi_\mu^{(v)}$ ,  $\mu = 0, \dots, 3$ , масса  $m_v$ ).

Эксперимент дает [3]:  $m_\pi c^2 = 138$  МэВ,  $m_\eta c^2 = 548$  МэВ,  $m_\rho c^2 = 769$  МэВ,  $m_\omega c^2 = 783$  МэВ и  $m_\delta c^2 = 983$  МэВ. Члены в соответствующем гамильтониане описывают заданные типы взаимодействий, симметрии полей и содержат чистые подгоночные параметры для описания экспериментальных данных [3].

Вклад от одночастичного обмена  $\pi$ - и  $\omega$ -мезонами отражает 2 важных свойства нуклон-нуклон взаимодействия.  $\pi$ -обмен приводит к дальнедействующим ( $\hbar/m_\pi c \approx 1,4$  фм) силам, в то время как  $\omega$ -обмен ответственен за короткодействующее ( $\hbar/m_\omega c \approx 0,25$  фм) отталкивание и за разумную величину спин-орбитального члена.

Двухпионный обмен ответственен за притяжение при средних ( $\hbar/2m_\pi c \approx 0,7$  фм) расстояниях, куда свой вклад дают и возбужденные резонансные состояния. Суммирование соответствующих фейнмановских диаграмм дает матрицы рассеяния, расчеты, которые могут быть сопоставлены с результатами экспериментов по столкновениям  $^2\text{H}$ .

Для проведения многочастичных расчетов необходимы псевдопотенциалы взаимодействий, строящихся на основе описанных выше теоретико-полевых мезонно-обменных методов. Обычно это делается в рамках однобозонной обменной модели (ОБО), когда многопионный обмен описывается обменом скалярного  $\sigma$ -мезона ( $m_\sigma c^2 \approx 550$  МэВ) с соответствующей константой нуклонной связи  $\sigma$ .

Член взаимодействия зависит не только от расстояния между частицами, но и от соседей и их волновых функций.

ОБО модели удается с хорошей точностью описать примерно 4300 результатов  $pp$ - и  $np$ -столкновительных экспериментов при энергиях  $\lesssim 350$  МэВ. Подобные данные по потенциалам можно найти в работах [86, 87].

Данные по нуклон-гиперонным (НГ) и гиперон-гиперонным (ГГ) взаимодействиям весьма скудны. Есть всего несколько точек по НГ взаимодействиям и нет ни одного по ГГ взаимодействиям. Доступными являются данные по  $A = 3$  и  $A = 4$  гиперядрам. В этих условиях для построения соответствующих потенциалов привлекаются соображения о типах симметрий взаимодействия (см. подробней [3]).

Энергия ядерной материи рассчитывается в такой постановке [3]: рассматривается система  $A_b$  нуклонов ( $N$  нейтронов и  $Z$  протонов) в пределе  $V \rightarrow \infty$ ,  $Z/A_b = \text{const}$ . В однородной ядерной материи  $n_n = N/V$ ;  $n_p = Z/V$ , и  $n_b = A_b/V = n_n + n_p$ . Пренебрегаем кулоновской энергией и разницей масс протона и нейтрона.

Для расчета УРС ядерной материи применяют метод функции Грина, являющийся, по-существу, вариантом теории возмущений, либо вариационные

методы, основанные на минимизации гамильтониана в пространстве многочастичных волновых функций  $\{\psi_{\text{var}}\}$  [78].

Хорошо известно, что основные свойства атомных ядер могут быть описаны двумя, на первый взгляд, различными моделями: оболочечной моделью и капельной моделью. В первой модели многочастичная проблема сводится к проблеме движения одной частицы и в некоем среднем поле других частиц. В капельной модели нуклоны настолько сильно взаимодействуют друг с другом, что их движение полностью коллективно, так что ядро похоже на каплю сильно связанных нуклонов. Анализ особенностей этих моделей с точки зрения теории поля представлен в работе [88], где взаимодействие нуклонов осуществляется скалярными и векторными мезонами. При этом скалярный мезон определяет притяжение на больших и средних расстояниях, объясняющее образование ядер из нуклонов и величину минимума потенциала, а векторный мезон определяет отталкивание и, таким образом, — энергию связи ядра. Похожие модели [88, 89] были развиты путем введения аналогичных мезонных полей и учета релятивистских эффектов.

В работе [88] предложена модель среднего поля с введением электронейтрального поля  $\sigma$  и  $\omega$  мезонов, где  $m_\sigma c^2 \approx 600$  МэВ. Вклад  $\omega$ -мезонов в межчастичный потенциал носит отрицательный характер и растет с ростом плотности. В результате потенциал имеет минимум, определяющий энергию связи ядра.

Релятивистское обобщение модели [88] представлено в работе [89], где среднее поле системы рассчитывается в приближении Хартри. Релятивистская модель среднего поля имеет много привлекательных черт. Она проста с вычислительной точки зрения, даже для многокомпонентной барионной материи, состоящей из нуклонов и гиперонов. Ее лоренц-инвариантность обеспечивает то, что скорость распространения возмущений всегда меньше скорости света.

Есть и недостатки. Мезонный подход предполагает, что среднее расстояние между нуклонами  $r_{\text{NN}}$  много меньше, чем пробег виртуального мезона  $r_\phi = \hbar/m_\phi c$ , что выполняется при  $n_b \gg 100n_0$ . Однако там, где модель соответствует эксперименту,  $r_{\text{NN}} \gg r_\phi$ . Есть и иные недостатки (см. [3]).

Согласно методу функционала плотности (МФП) [90], энергия многочастичной системы есть функционал одночастичных плотностей (гл. 7). Энергия основного состояния определяется минимизацией этого функционала. Модель МФП заметно упрощается в случае однородной спин-неполяризованной ядерной материи, где все зависит от  $n_p$  и  $n_n$ . Параметрическая форма зависимости  $E_N(n_n, n_p)$  выбирается так, чтобы удовлетворить экспериментальным данным, либо следует из более точных моделей [91, 92]. Ряд функционалов для УРС можно найти в работах [3, 93].

С ростом плотности барионов, высокоэнергетичные нейтроны начинают заменяться гиперонами [3]. Вместо плотности энергии нуклонов  $E_N(n_n, n_p)$  вводится более общий барионный функционал  $E_B(n_B)$ , где  $n_B$  — набор концентраций барионных частиц В:  $\sum n_B = n_b$ .

При  $n_b \lesssim 10n_0$  достаточно рассмотреть 8 легких барионов. Это ядерный зарядовый дублет N, зарядовый синглет  $\Lambda$ , зарядовый триплет  $\Sigma$  и зарядовый дублет  $\Xi$ . Параметры этих барионов приведены в табл. 11.2. Барионное

Таблица 11.2. [3]. Массы, электрические заряды, странности, и среднее измеренное время жизни барионного октета. Барионное число, спин, и соотношение параметров всех этих барионов 1, 1/2 и +1, соответственно

барион	$mc^2$ (МэВ)	$Q(e)$	$S$	$\tau(s)$
p	938,27	1	0	$> 10^{32}$
n	939,56	0	0	886
$\Lambda^0$	1115,7	0	-1	$2,6 \cdot 10^{-10}$
$\Sigma^+$	1189,4	1	1	$0,80 \cdot 10^{-10}$
$\Sigma^0$	1192,6	0	-1	$7,4 \cdot 10^{-20}$
$\Sigma^-$	1197,4	-1	-1	$1,5 \cdot 10^{-10}$
$\Xi^0$	1314,8	0	-2	$2,9 \cdot 10^{-10}$
$\Xi^-$	1321,3	-1	-2	$1,6 \cdot 10^{-10}$

поле  $\psi_B$  обладает хорошо определенными свойствами в изоспиновом пространстве, нуклоны и гиперон  $\Xi$  представлены изоспинорным полем,  $\Lambda$  — изоскалярным полем, а  $\Sigma$  — изовекторным полем.

Для расчета УРС [3], рассмотрим схему, состоящую из нуклонов, электронов и мюонов. Нуклоны представляют собой сильновзаимодействующую ферми-жидкость, а электроны и мюоны — квазиидеальный ферми-газ:

$$E(n_n, n_p, n_e, n_\mu) = E_N(n_n, n_p) + E_e(n_e) + E_\mu(n_\mu), \quad (11.16)$$

Условия равновесия,

$$\mu_n = \mu_p + \mu_e, \quad \mu_\mu = \mu_e, \quad (11.17)$$

отражают процессы слабого взаимодействия:

$$n \rightarrow p + e + \bar{\nu}_e, \quad p + e \rightarrow n + \nu_e, \quad (11.18)$$

$$n \rightarrow p + \mu + \bar{\nu}_\mu, \quad p + \mu \rightarrow n + \nu_\mu, \quad (11.19)$$

Обычно вещество бывает прозрачно для нейтрино, и они не дают вклада в термодинамику.

Для ультрарелятивистских электронов

$$\mu_e = \hbar c p_F \approx 122,1 \left( \frac{n_e}{0,05 n_0} \right)^{1/3} \text{ МэВ}. \quad (11.20)$$

Для среднерелятивистских мюонов

$$\mu_\mu = m_\mu c^2 \sqrt{1 + (\hbar p_F / m_\mu c)^2}. \quad (11.21)$$

Мюоны присутствуют, только если  $\mu_e > m_\mu c^2 = 105,65$  МэВ.

Давление ( $T = 0$ )

$$p = n_b^2 \left( \frac{d(E/n_b)}{dn_b} \right). \quad (11.22)$$

На рисунке 11.16 приведены уравнения состояния ядерной материи [3], рассчитанные по пяти моделям. Модели ВВВ1 и ВВВ2 — это модели Бракнера–Бете–Голдстоуна (ББГ), рассчитанные с разными нуклон-нуклонными потенциалами и моделями тройных взаимодействий. Модели APR и APR\*

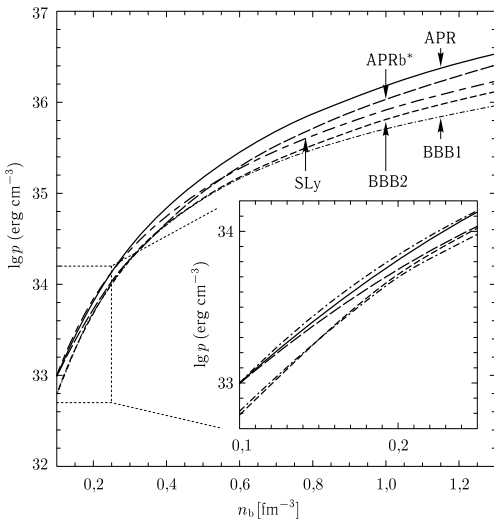


Рис. 11.16. Давление в зависимости от концентрации барионов для некоторых УРС (табл. 11.3) для *прем*-материи в бета равновесии. Из [3], воспроизводится с согласия авторов

основаны на вариационном методе с одинаковыми потенциалами нуклон-нуклонного взаимодействия, но с новым потенциалом тройных взаимодействий, уточненным по опытным данным. Отталкивательная часть  $UIX^*$  тройных нуклонных взаимодействий много слабее, чем в  $UIX$  взаимодействиях в рассчитанных УРС APR. Однако это не сильно влияет на результат. Наконец, УРС SLy основано на методе функционала плотности и близко к APR модели. Как мы уже видели, доля протонов сильно (кубично) зависит от энергии симметрии.

Предположение, что при  $\rho \gtrsim 2\rho_0$  вещество имеет тот же состав, что и при меньших сжатиях, составляет основу так называемой «минимальной» модели [3], которая лежит в основе моделей (табл. 11.3). Сопоставление результатов расчетов по УРС APR и APRb\* (рис. 11.16), показывает что включение релятивистских расчетов и уточнение потенциала трехчастичных нуклонных взаимодействий слабо влияет на УРС даже при  $n_b \approx 1,2 \text{ фм}^{-3}$ . УРС в моделях APR и APR\* «жестче», чем УРС со старыми версиями потенциалов.

На рис. 11.17 приведена зависимость показателя адиабаты от плотности:

$$\gamma = \frac{n_b}{p} \frac{dp}{dn_b} = \frac{p + E}{p} \frac{dp}{dE}, \quad (11.23)$$

Таблица 11.3. Уравнения состояния ядер нейтронных звезд [3]

УРС	Модель	ссылка
BPAL12	<i>прем</i> функционал плотности энергии	[94]
BGN1H1	<i>пр</i> $\Lambda$ $\Xi$ $\epsilon$ <i>м</i> функционал плотности энергии	[95]
FPS	<i>прем</i> функционал плотности энергии	[96]
BGN2H1	<i>пр</i> $\Lambda$ $\Xi$ $\epsilon$ <i>м</i> функционал плотности энергии	[95]
BGN1	<i>прем</i> функционал плотности энергии	[95]
BBB2	<i>прем</i> теория Бракнера, NN потенциал Парис + UVII NNN потенциал Урбана	[97]
BBB1	<i>прем</i> теория Бракнера, A14 NN потенциал Аргона + UVII NNN потенциал Урбана	[97]
SLy	<i>прем</i> функционал плотности энергии	[51]
APR	<i>прем</i> вариационная теория, A18 NN потенциал Аргона + UVII NNN потенциал Урбана	[78]
APRb*	<i>прем</i> вариационная теория, A18 NN потенциал Аргона с коррекцией давления + UVII NNN скорректированный потенциал Урбана	[78]
BGN2	<i>прем</i> функционал эффективной энергии нуклона	[95]

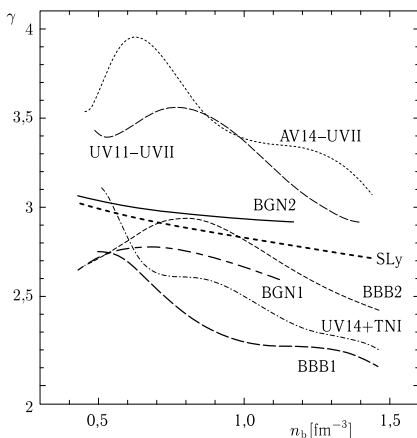


Рис. 11.17. Из [3], воспроизводится с согласия авторов. Показатель адиабаты *прем*-материи во внутреннем ядре нейтронной звезды и плотности барионов для отдельных УРС. Все, кроме трех УРС, взяты из таблицы 11.3, остальные УРС являются уравнениями из [77]

Такие зависимости  $\gamma(n_b)$  отражают описанные выше физические процессы в сжатом *пре-μ*-веществе.

С ростом сжатия при  $\rho \gtrsim 2\rho_0$ , как мы уже отмечали, в системе начинают образовываться гипероны. Их конденсация рассчитывается стандартными методами термодинамики [3] (см. рис. 11.18 и 11.19).

Появление гиперонов в системе хорошо видно на кривых состава (рис. 11.18, 11.19). Например, при  $n_b = 8n_0$  получается  $n_\Lambda \approx n_n$ . Расчеты показывают [3], что по мере сжатия сначала появляются  $\Sigma^-$ -гипероны. Гиперонизация вещества приводит к его делептонизации: отрицательно заряженные частицы  $e$  и  $\mu$  замещаются  $\Sigma^-$  и другими отрицательными гиперонами, а в конце остаются только  $\Sigma^+$ -гипероны. Так называемый «барионный суп» возникает при  $n_b \cong 1 \text{ фм}^{-3}$ .

Появление барионов «смягчает» УРС, так как высокоэнергетические нейтроны замещаются массивными малоэнергетическими барионами (которые дают меньшее давление). Это «смягчение» УРС иллюстрируется рис. 11.20. Изменение показателя адиабаты  $\gamma$  представлено на рис. 11.21.

Отметим, что УРС при  $n_b \geq 5n_0$  сильно зависит от модели. В частности, о трехчастичных взаимодействиях, включая гипероны, мало что известно.

Общие ограничения на УРС необходимы в области  $\rho > \rho_0$ , где особенно ограничены наши знания относительно поведения ядерного вещества. Основные требования общего характера к УРС — это условия причинности и лоренц-инвариантности. Их можно формулировать разным образом, например, вводя требование отсутствия

$$\text{ультрабаричности, } p > E, \quad (11.24)$$

$$\text{и сверхсветовой скорости звука } (v_s > c), \quad dp/dE > 1. \quad (11.25)$$

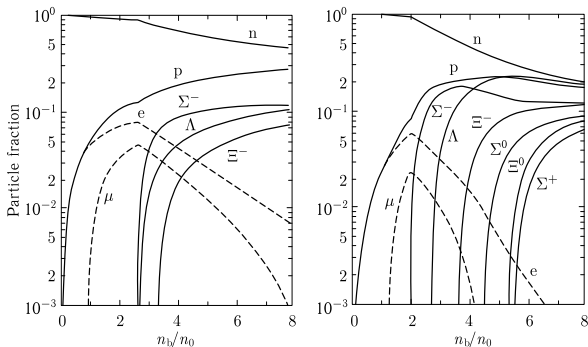


Рис. 11.18. Зависимости отношения  $x_j = n_j/n_b$  от барионной плотности  $n_b$  (в единицах  $n_0 = 0,16 \text{ фм}^{-3}$ ) вычисляются [98] для двух релятивистских моделей барионного взаимодействия. Слева — эффективная киральная модель [98]. Справа — релятивистская модель среднего поля TM1 из [99]. Из [3], воспроизводится с согласия авторов

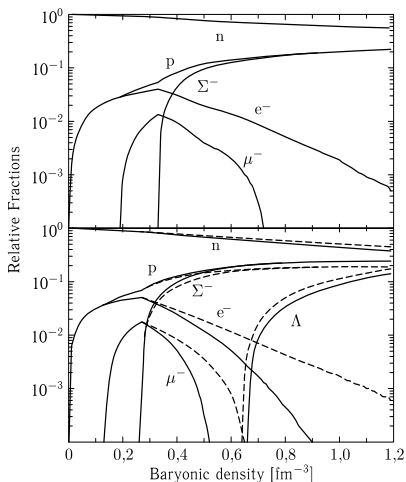


Рис. 11.19. Равновесный состав  $x_j = n_j/n_b$  в зависимости от  $n_b$ , рассчитанной [100] в приближении ВНФ для двух моделей барионного взаимодействия. Вверху — модель Неймегена Е [101]: только  $\Sigma^-$  гиперон присутствует в ядрах нейтронных звезд. Внизу — APR-модель для сектора нуклонов (табл. 11.3, [78]) и модель Неймегена Е [101] для NN и NN взаимодействий. В отличие от верхнего рисунка,  $\Lambda$  присутствует в плотной материи. Сплошные линии на рисунках: все барион-барион (NN, NN, NN) взаимодействия включены. Пунктирные линии в нижней панели: NN взаимодействия (искусственно) выключены. Из [3], воспроизводится с согласия авторов

Нарушения условия  $v_s < c$  отмечены для ряда УРС звездочками на рис. 11.22.

В работах [103–107] проанализирована проблема связи условия  $v_s < c$  с условиями лоренц-инвариантности и причинности.

Как связано обсуждаемое УРС с принципом причинности? Условие  $v_s > c$  может отражать отсутствие причинности, так как сигнал распространяется в этом случае быстрее света. Однако,  $v_s > c$  может быть результатом интерференции некоторых специальных компонентов звуковых волн, когда высокочастотные компоненты усиливаются, а низкочастотные — затухают.

Резюмируя, можно считать, что лоренц-инвариантность и причинность не исключают возможности  $v_s > c$ . Однако, соответствующие опровергающие причинность примеры относятся к ультравысоким плотностям, большим, чем характерные плотности деконфайнмента кварков.

Заключая этот раздел, отметим еще раз, что наши экспериментальные сведения относительно свойств ядерной материи сильно ограничены, если речь идет о температурах и плотностях, превосходящих основное состояние

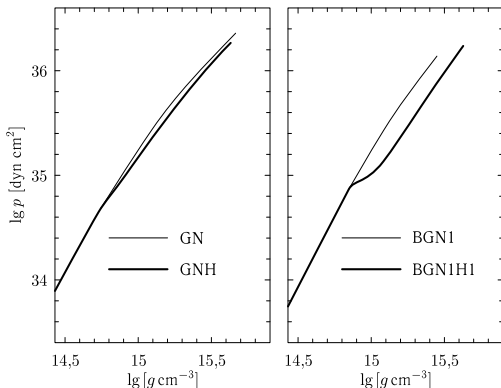


Рис. 11.20. Смягчение УРС наличием гиперонов. Зависимости показывают УРС с гиперонами (жирная линия) и без них (тонкая линия). Слева — модель УРС [102]. Справа — BGN1 и BGN1H1 УРС из [95] (см. табл. 11.3). Из [3], воспроизводится с согласия авторов

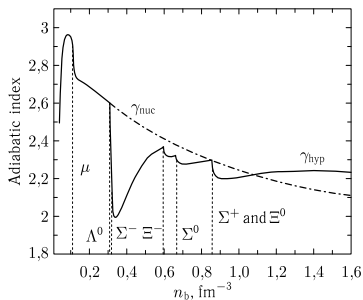


Рис. 11.21. Показатель адиабаты  $\gamma$  в зависимости от  $n_b$  в ядре нейтронной звезды. Расчеты выполнены для модельного УРС [102]. Сплошная линия ( $\gamma_{hyp}$ ) — гиперонное вещество (вертикальные пунктирные линии указывают на пороги появления мюонов и гиперонов); штрихпунктирная линия ( $\gamma_{nuc}$ ) соответствует случаю, когда появление гиперонов искусственно запрещено. Из [3], воспроизводится с согласия авторов

с  $\rho_0 \approx 0,15 \text{ фм}^{-3}$  [75]. В этой области адронная материя может демонстрировать большое разнообразие свойств и структур часто самого экзотического свойства. При  $T < 20 \text{ МэВ}$  и  $\rho < \rho_0$  возможно ядерное испарение [75] и появление адронного ядерного вещества (пионный конденсат и изомеры) при высоких плотностях  $\rho > 3\rho_0$ .

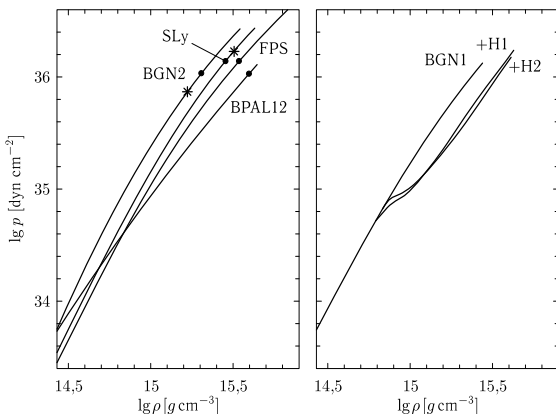


Рис. 11.22. Модельные УРС ядер нейтронной звезды (см. табл. 11.3). Жирные точки показывают максимальные плотности в стабильных нейтронных звездах, в то время как звездочки указываются плотности, выше которых УРС являются сверхсветовыми ( $v_s > c$ ). Из [3], воспроизводится с согласия авторов

Пионизация ядерной материи предсказывается при  $T > 50$  МэВ. Фазовый переход, вызванный деконфайнментом кварков и переходом ядерной материи в состояние кварк-глюонной плазмы, как мы увидим в следующей главе, имеет место при  $\rho > 50\text{--}10\rho_0$  и  $T \approx 150\text{--}250$  МэВ. Такие экзотические состояния материи возникали, по-видимому, в первые миллисекунды после Большого взрыва и продолжают возникать в процессе взрыва сверхновых [2, 54] и образования нейтронных звезд [3], а также при релятивистском столкновении тяжелых ядер [75].

Особенно интересны работы по предсказанию высоких сжатий в ядерных ударных волнах (см. гл. 12) «франкфуртской» школой физиков под руководством В. Грейнера и Х. Штокера [75]. В этих элегантных работах была не только создана красивая гидродинамическая теория релятивистского столкновения тяжелых ядер, но и разработан метод получения уравнений состояния на основе наблюдаемых столкновительных данных (фрагменты, пионы и т. п.).

### Список литературы

1. Хазанов Е. А., Сергеев А. М. Петаваттные лазеры на основе оптических параметрических усилителей: состояние и перспективы // УФН. — 2008. — Т. 178, No. 9. — С. 1006.
2. Фортон В. Е. Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.

3. *Haensel P., Potekhin A. Y., Yakovlev D. G.* Neutron stars 1: Equation of state and structure. — N.Y.: Springer, 2007. — V. 326 of Astrophysics and Space Science Library.
4. *Gyulassy M.* Quark Gluon Plasmas: Femto Cosmology with A+A @ LHC. — 2008.
5. *Baym G.* Matter under extreme conditions. — 2007.
6. *Киржниц Д.* Экстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, № 7. — С. 489.
7. *Засов А., Постнов К.* Общая астрофизика. — Фрязино: Век-2, 2006.
8. *Яковлев Д. Г., Левенфиш К. П., Шибанов Ю. А.* Остывание нейтронных звезд и сверхтекучесть в их ядрах // УФН. — 1999. — Т. 169, № 8. — С. 825.
9. *Потехин А. Ю.* Физика нейтронных звезд УФН. — 2010. — Т. 180. — С. 1279.
10. *Shapiro S. L., Teukolsky S. A.* Black Holes, White Dwarfs, and Neutron Stars: The Physics of Compact Objects. — N.Y.: Wiley, 1983. (*Шapiro С., Тьюколски С.* Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды / Пер. с англ. Под ред. Я. А. Смородинского. — В 2-х ч. — М.: Мир, 1985.)
11. *Истомин Н.* Генерация электронно-позитронной плазмы в магнитосфере нейтронных звезд // УФН. — 2008. — Т. 178, № 8. — С. 880.
12. *Vaade W., Zwicky F.* Cosmic Rays from Super-Novae // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. — 1934. — V. 20, No. 5. — P. 259.
13. *Киржниц Д.* Лекции по Физике. — М.: Наука, 2006.
14. *Имшенник В.* Экспериментальные возможности изучения процессов нейтронизации вещества в звездах // Ядерная физика. — 1995. — Т. 58. — С. 888.
15. *Drake R.* High-Energy-Density Physics. — Berlin-Heidelberg: Springer, 2006.
16. Nucleosynthesis and Clump Formation in a Core-Collapse Supernova / *Kifonidis K., Plewa T., Janka H.-T., Muller E.* // Astrophysical Journal Letters. — 2000. — V. 531. — P. L123.
17. *Imshennik V. S.* Explosion mechanism in supernovae collapse // Space Science Reviews. — 1995. — V. 74, No. 3-4. — P. 325.
18. *Имшенник В., Надёжин Д.* Сверхновая 1987А в Большом Магеллановом Облаке: наблюдения и теория // УФН. — 1988. — Т. 156, № 12. — С. 561.
19. *Baym G., Pethick C., Sutherland P.* The Ground State of Matter at High Densities: Equation of State and Stellar Models // Astrophys. J. — 1971. — V. 170. — P. 299.
20. *Page D., Applegate J.* // The Astrophysical Journal Letters. — 1992. — V. 394. — P. L17.
21. *Окунь Л.* Лептоны и кварки. — 2 изд. — М.: Наука, 1990.
22. *Попов С. Б., Прохоров М. Е.* Звезды: жизнь после смерти // Астрономия XXI век / Под ред. В. Г. Сурдина. — Фрязино: Век-2, 2007. — С. 183.
23. *Кувелиоту К., Дункан Р., Томпсон К.* Магнитары // Альманах «Космос». — М.: В мире науки, 2006. — С. 134.
24. *Попов С. Б., Прохоров М. Е.* Астрофизика одиночных нейтронных звезд: радиотихие нейтронные звезды и магнитары. — М.: ГАИШ МГУ, 2002.
25. *Hands S.* The phase diagram of QCD // Journal of Contemporary Physics. — 2001. — V. 42, No. 4. — P. 209.
26. *Новиков И. Д.* Отзвуки Большого взрыва (наблюдения реликтового излучения) (Сессия РАН 28.02.2001) // УФН. — 2001. — Т. 171, № 8. — С. 859.
27. *Rubakov V.* Introduction to Cosmology // Proceedings of Science RTN (2005)003. — 2005.

28. *Glendenning N.* Compact Stars, Nuclear Physics, Particle Physics and General Relativity. — N.Y.: Springer, 2000.
29. Quark phases in neutron stars and a third family of compact stars as signature for phase transitions / *Schertler K., Greinera C., Schaffner-Bielich J., Thoma M.* // Nuclear Physics A. — 2001. — V. 677, No. 1–4. — P. 463.
30. *Lyutikov M.* Magnetar giant flares and afterglows as relativistic magnetized explosions // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2006. — V. 367, No. 4. — P. 1594.
31. Самый яркий космический взрыв за все время наблюдений.  
<http://space.rin.ru/news/html/2877.html>.
32. *Beloborodov A. M.* Untwisting magnetospheres of neutron stars // Astrophys. J. — 2009. — V. 703. — P. 1044.
33. *Киржниц Д. А.* Полевые методы теории многих частиц. — М.: Атомиздат, 1963. — [D.A. Kirzhnits, Field-Theoretical Methods in Many-body Systems, Oxford, Pergamon Press, 1967.].
34. *Киржниц Д. А.* Эстремальные состояния вещества (сверхвысокие давления и температуры) // УФН. — 1971. — Т. 104, №3. — С. 489.
35. *Bonche P., Vautherin D.* A mean field calculation of the equation of state of supernova matter // Nucl. Phys. A. — 1981. — V. 372. — P. 496.
36. *Marcos S., Barranco M., Buchler J.-R.* Low entropy adiabats for stellar collapse // Nucl. Phys. A. — 1982. — V. 381. — P. 507.
37. *Ogasawara R., Sato K.* Nuclei in the neutrino-degenerate dense matter. II // Prog. Theor. Phys. — 1983. — V. 70. — P. 1569.
38. Physical properties of hot, dense matter: The general case / *Lattimer J. M., Pethick C. J., Ravenhall D. G., Lamb D. Q.* // Nucl. Phys. A. — 1985. — V. 432. — P. 646.
39. *Baym G., Pethick C., Sutherland P.* Statistical mechanics of simple Coulomb systems // Astrophys. J. — 1971. — V. 170. — P. 299.
40. *Salpeter E. E.* Energy and pressure of a zero-temperature plasma // Astrophys. J. — 1961. — V. 134. — P. 669.
41. *Haensel P., Pichon B.* Experimental nuclear masses and the ground state of cold dense matter // Astron. Astrophys. — 1994. — V. 283. — P. 313.
42. *Negele J. W., Vautherin D.* Neutron star matter at subnuclear densities // Nucl. Phys. A. — 1973. — V. 207. — P. 298.
43. *Кон В.* Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // УФН. — 2002. — Т. 172, №3. — С. 336.
44. *Buchler J.-R., Barkat Z.* Properties of low-density neutron-star matter // Phys. Rev. Lett. — 1971. — V. 27. — P. 48.
45. *Douchin F., Haensel P.* Inner edge of neutron-star crust with SLy effective nucleon-nucleon interactions // Phys. Lett. B. — 2000. — V. 485. — P. 107.
46. *Lorenz C. P., Ravenhall D. G., Pethick C. J.* Neutron star crusts // Phys. Rev. Lett. — 1993. — V. 70. — P. 379.
47. *Oyamatsu K.* Nuclear shapes in the inner crust of a neutron star // Nucl. Phys. A. — 1993. — V. 561. — P. 431.
48. The fate of a neutron star just below the minimum mass: does it explode? / *Sumiyoshi K., Yamada S., Suzuki H., Hillebrandt W.* // Astron. Astrophys. — 1998. — V. 334. — P. 159.
49. *Pethick C. J., Ravenhall D. G., Lorenz C.* The inner boundary of a neutron-star crust // Nucl. Phys. A. — 1995. — V. 584. — P. 675.

50. *Pethick C. J., Ravenhall D. G.* Matter at large neutron excess and the physics of neutronstar crusts // *Annu. Rev. Nucl. Sci.* — 1995. — V. 45. — P. 429.
51. *Douchin F., Haensel P.* A unified equation of state of dense matter and neutron star structure // *Astron. Astrophys.* — 2001. — V. 380. — P. 151.
52. *Carter B., Quintana H.* Foundations of general relativistic high-pressure elasticity theory // *Proc. Roy. Soc. London Ser. A.* — 1972. — V. 331. — P. 57.
53. *Ogata S., Ichimaru S.* First-principles calculations of shear moduli for Monte Carlo simulated Coulomb solids // *Phys. Rev. A.* — 1990. — V. 42. — P. 4867.
54. *Фортвов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // *УФН.* — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
55. *Bahcall J. N., Wolf R. A.* Neutron stars. II. Neutrino-cooling and observability // *Phys. Rev.* — 1965. — V. 140. — P. B1452.
56. *Migdal A. B.* Stability of vacuum and limiting fields // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1971. — V. 61. — P. 2209.
57. *Migdal A. B.* Phase transitions in nuclear matter and non-pair nuclear forces // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1972. — V. 63. — P. 1993.
58. *Sawyer R. F.* Condensed  $\pi^-$  phase in neutron-star matter // *Phys. Rev. Lett.* — 1972. — V. 29. — P. 382.
59. *Scalapino D. J.*  $\pi^-$  condensate in dense nuclear matter // *Phys. Rev. Lett.* — 1972. — V. 29. — P. 386.
60. *Kaplan D. B., Nelson A. E.* “Strange goings in dense nucleonic matter // *Phys. Lett. B.* — 1986. — V. 175. — P. 57.
61. New extended model of hadrons / *A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson et al.* // *Phys. Rev. D.* — 1974. — V. 9. — P. 3471.
62. *Witten E.* Cosmic separation of phases // *Phys. Rev. D.* — 1984. — V. 30. — P. 272.
63. *Lee T. D., Wick G. C.* Vacuum stability and vacuum excitation in a spin-0 field theory // *Phys. Rev. D.* — 1974. — V. 9. — P. 2291.
64. *Bahcall S., Lynn B. W., Selipsky S. B.* New models for neutron stars // *Astrophys. J.* — 1990. — V. 362. — P. 251.
65. Pion degrees of freedom in nuclear matter / *Migdal A. B., Saperstein E. E., Troitsky M. A., Voskresensky D. N.* // *Phys. Rep.* — 1990. — V. 192. — P. 179.
66. *Migdal A. B.* Meson condensation and anomalous nuclei // *Phys. Lett. B.* — 1974. — V. 52. — P. 172.
67. *Hartle J. B., Sawyer R. F., Scalapino D. J.* Pion condensed matter at high densities: equation of state and stellar models // *Astrophys. J.* — 1975. — V. 199. — P. 471.
68. *Kunihiro T., Takatsuka T., Tamagaki R.* Neutral pion condensation in hot and dense nuclear matter // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* — 1993. — V. 112. — P. 197.
69. *Kolehmainen K., Baym G.* Pion condensation at finite temperature (II). Simple models including thermal excitations of the pion field // *Nucl. Phys. A.* — 1982. — V. 382. — P. 528.
70. *Ramos A., Schaffner-Bielich J., Wambach J.* Kaon condensation in neutron stars // *Physics of Neutron Star Interiors* / Ed. by D. Blaschke, N. K. Glendenning, A. Sedrakian. — V. 578 of *Lecture Notes in Phys.* — 2001. — P. 175. — [nucl-th/0011003].
71. *Pandharipande V. R., Pethick C. J., Thorsson V.* Kaon Energies in Dense Matter // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — V. 75, No. 25. — P. 4567.
72. *Kolomeitsev E. E., Voskresensky D. N.* Negative kaons in dense baryonic matter // *Phys. Rev. C.* — 2003. — V. 68, No. 1. — P. 015803.
73. Kaon condensation in proto-neutron star matter / *Pons J. A., Reddy S., Ellis P. J. et al.* // *Phys. Rev. C.* — 2000. — V. 62, No. 3. — P. 035803.

74. Evolution of proto-neutron stars with kaon condensates / *Pons J. A., Miralles J. A., Prakash M., Lattimer J. M.* // *Astrophys. J.* — 2001. — V. 553. — P. 382.
75. *Stöcker H., Greiner W.* High energy heavy ion collisions—probing the equation of state of highly excited hadronic matter // *Phys. Rep.* — 1986. — V. 137, No. 5-6. — P. 277.
76. *Csernai L. P., Kapusta J. I.* Entropy and cluster production in nuclear collisions // *Phys. Rep.* — 1986. — V. 131, No. 4. — P. 223.
77. *Wiringa R. B., Fiks V., Fabrocini A.* Equation of state for dense nucleon matter // *Phys. Rev. C.* — 1988. — V. 38. — P. 1010.
78. *Akmal A., Pandharipande V. R., Ravenhall D. G.* Equation of state of nucleon matter and neutron star structure // *Phys. Rev. C.* — 1987. — V. 58. — P. 1804.
79. High density symmetric nuclear matter in Bethe-Brueckner-Goldstone approach / *Baldo M., Fiasconaro A., Song H. Q. et al.* // *Phys. Rev. C.* — 2001. — V. 65. — P. 017303.
80. *Tsuruta S., Cameron A. G. W.* Some effects of nuclear forces on neutron-star models // *Canadian J. Phys.* — 1966. — V. 44. — P. 1895.
81. *Weber F., Weigel M. K.* Neutron star properties and the relativistic nuclear equation of state of many baryon matter // *Nucl. Phys. A.* — 1989. — V. 493. — P. 549.
82. *Weber F., Weigel M. K.* Baryon composition and macroscopic properties of neutron stars // *Nucl. Phys. A.* — 1989. — V. 505. — P. 779.
83. *Bethe H. A.* What holds the nucleus together // *Scientific American.* — 1953. — V. 189. — P. 58.
84. *Schiavilla R., Pandharipande V. R., Wiringa R. B.* Momentum distributions in  $A = 3$  and 4 nuclei // *Nucl. Phys. A.* — 1986. — V. 449. — P. 219.
85. Quantum Monte Carlo calculations of  $A \leq 6$  nuclei / *Pudliner B. S., Pandharipande V. R., Carlson J., Wiringa R. B.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — V. 74. — P. 4396.
86. Construction of high-quality NN potential models / *Stoks V. G. J., Klomp R. A. M., Terheggen C. P. F., de Swart J. J.* // *Phys. Rev. C.* — 1994. — V. 49. — P. 2950.
87. *Wiringa R. B., Stoks V. G. et al.* Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking // *Phys. Rev. C.* — 1995. — V. 51. — P. 38.
88. *Johnson M. H., Teller E.* Classical field theory of nuclear forces // *Phys. Rev.* — 1955. — V. 98. — P. 783.
89. *Duerr H. P.* Relativistic effects in nuclear forces // *Phys. Rev.* — 1956. — V. 103. — P. 469.
90. *Kohn W., Sham L. J.* Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Phys. Rev.* — 1965. — V. 140. — P. A1133.
91. A Skyrme parameterization from subnuclear to neutron star densities / *Chabanat E., Bonche P., Haensel P. et al.* // *Nucl. Phys. A.* — 1997. — V. 627. — P. 710.
92. A Skyrme parameterization from subnuclear to neutron star densities. Part II. Nuclei far from stabilities / *Chabanat E., Bonche P., Haensel P. et al.* // *Nucl. Phys. A.* — 1997. — V. 635. — P. 231.
93. Nuclear matter and neutron-star properties calculated with the Skyrme interaction / *Rikovska Stone J., Miller J. C., Konciewicz R. et al.* // *Phys. Rev. C.* — 2003. — V. 68, No. 3. — P. 034324.
94. *Bombaci I.* An equation of state for asymmetric nuclear matter and the structure of neutron stars // *Perspectives on Theoretical Nuclear Physics* / Ed. by I. Bombaci, A. Bonaccorso, A. Fabrocini, others. — Pisa: Edizioni ETS, 1995. — P. 223.

95. *Balberg S., Gal A.* An effective equation of state for dense matter with strangeness // Nucl. Phys. A. — 1997. — V. 625. — P. 435.
96. *Pandharipande V. R., Ravenhall D. G.* Hot nuclear matter // Nuclear Matter and Heavy Ion Collisions / Ed. by M. Soyeur, H. Flocard, B. Tamain, M. Porneuf. — Dordrecht: Reidel, 1989. — P. 103.
97. *Baldo M., Bombaci I., Burgio G. F.* Microscopic nuclear equation of state with three-body forces and neutron-star structure // Astron. Astrophys. — 1997. — V. 328. — P. 274.
98. Neutron star properties in a chiral SU(3) model / *Hanauske M., Zschieche D., Pal S. et al.* // Astrophys. J. — 2000. — V. 537. — P. 958.
99. *Sugahara Y., Toki H.* Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with non-linear  $\sigma$  and  $\omega$  terms // Nucl. Phys. A. — 1994. — V. 579. — P. 557.
100. Hyperon-hyperon interactions and properties of neutron star matter / *Vidana I., Polls A., Ramos A. et al.* // Phys. Rev. C. — 2000. — V. 62. — P. 035801.
101. *Rijken T. A., Stoks V. G. J., Yamamoto Y.* Soft-core hyperon-nucleon potentials // Phys. Rev. C. — 1999. — V. 59. — P. 21.
102. *Glendenning N. K.* Neutron stars are giant hypernuclei? // Astrophys. J. — 1985. — V. 293. — P. 470.
103. *Bludman S. A., Ruderman M. A.* Possibility of the speed of sound exceeding the speed of light in ultradense matter // Phys. Rev. — 1968. — V. 170. — P. 1176.
104. *Bludman S. A., Ruderman M. A.* Noncausality and instability in ultradense matter // Phys. Rev. D. — 1970. — V. 1. — P. 3243.
105. *Ruderman M. A.* Causes of sound faster than light in classical models of ultradense matter // Phys. Rev. — 1968. — V. 172. — P. 1286.
106. *Caporaso G., Brecher K.* Must ultrabaryonic matter be superluminal? // Phys. Rev. D. — 1979. — V. 20. — P. 1823.
107. *Olson T. S.* Maximally incompressible neutron star matter // Phys. Rev. C. — 2000. — V. 63. — P. 015802.
108. *Lai D., Shapiro E. E.* Cold equation of state in strong magnetic field — Effects of inverse beta-decay // Astrophys. J. — 1991. — V. 383. — P. 745.
109. *Bocquet M., Bonazzola S et al.* Rotating neutron star models with a magnetic field // Astron. Astrophys. — 1995. — V. 301. — P. 757.
110. *Möller P., Nix J. R.* Nuclear masses from a unified macroscopic-microscopic model // Atom. Data Nucl. Data Tables. — 1988. — V. 39. — P. 213.
111. *Strohmayer T. E., Bildsten L.* New views of thermonuclear bursts // Compact Stellar X-ray Sources / Eds. W.H.G. Lewin, M. van der Klis. — Cambridge Astrophysics Series. — 2006. — No. 39. — Cambridge Univ. Press. — P. 113.
112. *Potekhin A. Y., Chabrier G.* Equation of state for magnetized Coulomb plasmas // Astron. Astrophys. — 2013. — V. 550. — P. A43.

**КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА И СТРАННАЯ МАТЕРИЯ**

В пределе высоких плотностей УРС вырожденного адронного вещества адроны заметно упрощается. Кварки более не связаны в адроны и представляют собой слабовзаимодействующий ферми-газ [1].

**12.1. Деконфайнмент кварков и кварк-глюонная плазма**

Кварковая модель адронов Гелл-Манна и Цвейга начала быстро развиваться во второй половине 1960-х годов [2]. Открытие скейлинга в глубоко-неупругих электрон-нуклоновых реакциях в конце 1960-х годов показало, что на малых расстояниях или при передаче очень большого импульса составляющие нуклонов (валентные кварки) ведут себя как слабовзаимодействующие точечные частицы. При этом, чтобы кварки оставались в адронах и не могли существовать в свободном виде, взаимодействие между ними должно быть очень сильным на больших расстояниях или при передаче малого импульса. Политцер, Гросс и Вильчек [3, 4], получившие Нобелевскую премию в 2004 году, показали, что только перенормируемая теория поля кварков, отражающая увеличение сил взаимодействия на больших расстояниях и их уменьшение на малых, достаточно хорошо описывает свойства, открытые Янгом и Миллсом [5]. Для того, чтобы описать систематику адронов, предположили, что кварк должен быть фермионом со спином  $1/2$ , иметь дробный электрический заряд и находиться в одном из трех цветовых состояний (цвет — новый квантовый заряд, аналогичный электрическому). Взаимодействие между кварками переносится глюонами («клей», который держит их вместе). Глюоны — безмассовые бозоны со спином 1, как и фотоны, но, в отличие от них, являющиеся носителями цветового заряда и поэтому точно взаимодействующие между собой. Такая теория называется неабелевой калибровочной теорией [2]. Эта теория кварков и глюонов — квантовая хромодинамика (КХД) — является общепринятой теорией сильных взаимодействий.

Во второй половине 1970-х годов стало ясно, что с ростом температуры и плотности должны происходить качественные изменения свойств адронной материи. Такая сжатая система может быть описана с точки зрения пионов, нуклонов и других адронов. В очень плотной среде эти протяженные и сложные частицы будут перекрываться, а кварки и глюоны смогут свободно перемещаться в пространстве. Возможен даже фазовый переход к цветному

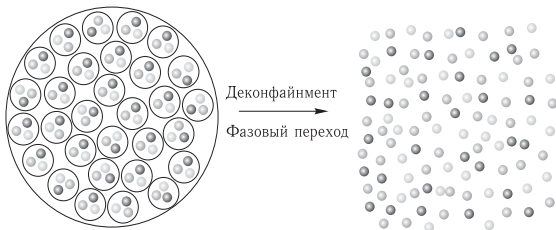


Рис. 12.1. Образование кварк-глюонной плазмы. При обычных условиях (слева) кварки (шарики) связаны в адронах. При температурах  $T > T_c$  происходит деконфайнмент кварков, они перестают быть связанными в адронах и образуют кварк-глюонную плазму

деконфайнменту при температуре в несколько сотен МэВ и барионной плотности, примерно в десять раз превышающей нормальную ядерную плотность (см. рис. 11.3). Фазовый переход от адронного газа к кварк-глюонной плазме (рис. 12.1) требует очень высокой плотности энергии. Такой переход мог произойти в очень ранней Вселенной, в течение первых микросекунд после Большого взрыва. Он может происходить внутри нейтронных звезд и при релятивистском столкновении тяжелых ядер при очень высоких энергиях в ускорителях частиц [6].

Генерация КГП, кварк-глюонной плазмы, осуществляется при релятивистском столкновении тяжелых ионов (ТЯ) и возникает при деконфайнменте кварков: при энергиях  $\geq 200$  МэВ [7–9]. Схема эксперимента такова: при столкновении двух ядер [10] кинетическая энергия движения переходит во внутреннюю энергию нуклонов, что в соответствии с предсказаниями квантовой хромодинамики (КХД) [8] приводит к появлению так называемого (color glass condensate) «конденсата цветного стекла», а затем, по мере термализации, — к образованию нового состояния вещества, — кварк-глюонной плазмы, — или как ее еще называют «кваркового супа» [7, 8] (рис. 12.1). При этом предполагается, что времени столкновения достаточно для термализации вещества, так что кинетическая энергия успевает (это является предметом отдельного рассмотрения) перейти во внутреннюю энергию образующейся плазмы.

Возникающая при таких столкновениях КГП состоит из кварков, антикварков и глюонов [11–14]. Такую плазму иногда называют наиболее «старой» формой материи, так как она существовала уже в первые микросекунды после Большого взрыва, и из которой по мере расширения и охлаждения образовались адроны. КГП обладает максимальной плотностью, примерно  $9\text{--}10\rho_0$  ( $\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14}$  г/см<sup>3</sup> — ядерная плотность) и может возникать в центре нейтронных звезд, черных дыр или при коллапсе обычных звезд. Для поисков КГП сегодня развернуты масштабные экспериментальные программы по столкновению ультрарелятивистских ионов на ускорителях HERA, RHIC в Брукхейвене, GSI в Дармштадте и SPS, LHC в ЦЕРНе (см. рис. 11.3). Речь

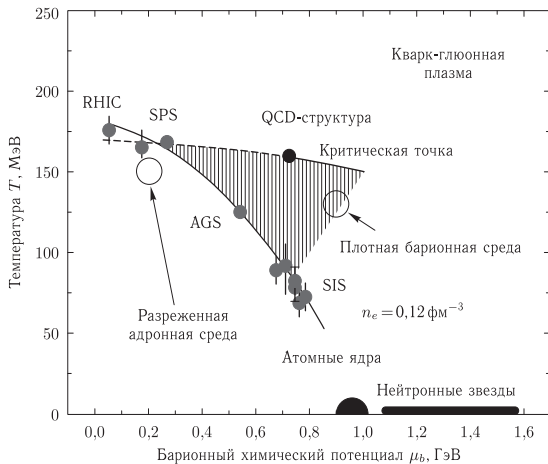


Рис. 12.2. Фазовая диаграмма ядерной материи

идет о столкновении тяжелых ядер с энергиями порядка 100 ГэВ и выше на ядро в системе центра масс или с энергиями 20 ТэВ на ядро в лабораторной системе координат. Условия, достижимые на современных ускорителях, приведены на фазовых диаграммах ядерной материи (рис. 12.2, 11.3). Область низких температур и барионных плотностей занята адронами (ядрами и мезонами) [12–16]. Предельный случай высоких плотностей (в 5–10 раз больше ядерной плотности,  $\rho_0 \approx 2,8 \cdot 10^{14} \text{ г/см}^3$ ) и высоких ( $T > 200 \text{ МэВ} \approx 10^{12} \text{ К}$ ) температур соответствует кваркам и глюонам, которые при этих условиях не связаны в адронах, образуя «кварк-глюонную плазму». Переход между этими состояниями может быть размытым или резким, типа фазового перехода первого рода с критической точкой (рис. 12.2). Для описания поведения в соответствующей области фазовой диаграммы сжатой барионной материи используются методы квантовой хромодинамики, которые сами в данном случае являются предметом экспериментальной проверки.

КГП является существенным экспериментом трансформации материи после момента зарождения нашей Вселенной [6, 17]. В течение первых микросекунд после Большого взрыва [12, 13] температура уменьшается как  $T(\text{МэВ}) \sim 1/\sqrt{t}$ , здесь  $t$  — время в секундах, так что КГП с температурой в сотни МэВ могла существовать в течение первых 5–10 мкс после Большого взрыва. При этом барионная плотность была не столь высока. По мере расширения Вселенной плазма охлаждалась, вызывая «адронизацию» вещества и последующее образование пионов. Если происходил переход первого рода, то

внутри плазмы возможно было образование «пузырей» адронов — нейтронов, протонов и пионов.

КГП [18–21] является сверхплотной и сверхгорячей формой ядерной материи с несвязанными кварками и глюонами, которые при меньших энергиях связаны в адронах (рис. 12.1).

В таблице 12.1 приведены характеристики кварков, из которых состоят адроны. Например:

$$\begin{aligned} \text{протон} &= u + u + d, \\ \text{нейтрон} &= u + d + d, \\ \pi^+ &= u + \bar{d} \text{ и т. п.} \end{aligned}$$

Т а б л и ц а 12.1. Характеристики кварков

Обозначение	Название сорта кварка его аромат	Заряд, $ e $	Масса, МэВ
<i>u</i>	<i>up</i> — вверх*	2/3	5
<i>d</i>	<i>down</i> — вниз*	-1/3	10
<i>s</i>	<i>strange</i> — странный (странность, $S = -1$ )	-1/3	150
<i>c</i>	<i>charm</i> — очарованный (очарование, $C = +1$ )	2/3	1300
<i>b</i>	<i>beauty</i> — красивый (прелестный) (красота (прелесть), $B = +1$ )	-1/3	4200
<i>t</i>	<i>top</i> — верхний**, <i>truth</i> — правдивый (истинный)	2/3	175000

\* Название аромата отсутствует, и соответствующее аддитивное квантовое число не употребляется.

\*\* Общепринятого названия аромата нет.

## 12.2. Наблюдаемые проявления кварк-глюонной плазмы

Существование КГП следует из свойства асимптотической свободы квантовой хромодинамики [1, 22–24], которая дает значение плотности энергии соответствующего перехода, близкой к плотности энергии внутри протона, что на порядок выше плотности энергии ядра и составляет 1–10 ГэВ/фм<sup>3</sup>. Детальные численные расчеты дают критические условия возникновения КГП:  $T_c \approx 150\text{--}200 \text{ МэВ} \approx (1,8\text{--}2,4) \cdot 10^{12} \text{ К}$  (рис. 12.3).

Появление такой плазмы проявляется как увеличение числа степеней свободы с адронного, равного от 3 до 8 у глюонов, умноженного на 2 спиновых, плюс 2–3 легкого аромата кварков (at light flavors), которые в свою очередь имеют 2 спина и 3 цвета. Таким образом, согласно квантовой электродинамике, кварки обладают 24–26 степенями свободы, а в кварк-глюонной плазме при  $T \approx (1\text{--}3)T_c$  возбуждается 40–50 степеней свободы против 3 у пионного газа низких,  $T < T_c$ , температур. Так как плотность энергии, давление и энтропия приблизительно пропорциональны числу возбужденных степеней

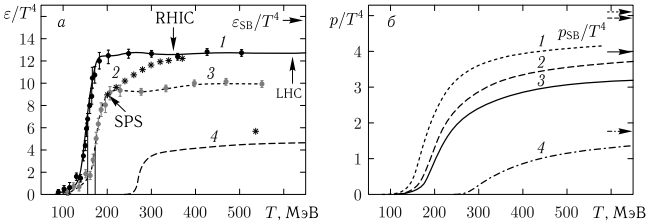


Рис. 12.3. Квантово-хромодинамические расчеты зависимостей плотности энергии (а) и давления (б) от температуры [7]. 1 – 3 аромата; 2 – 2 + 1 аромат; 3 – 2 аромата; 4 – 0 ароматов. (Нижний индекс SB – от Stefan–Boltzmann.) Наиболее реалистичный случай соответствует 2 + 1 ароматам

свободы системы, резкое изменение этих термодинамических параметров в узком диапазоне температур около  $T_c$  и объясняет большую (рис. 12.3) разницу энергий обычного ядерного вещества и КГП.

С учетом сказанного, уравнение состояния идеальной,  $g \rightarrow 0$ , КГП имеет вид [25]

$$p_{SB}^{QCD}(T) = \underbrace{(2_s \times 8_c)}_{\text{глюоны}} + \frac{7}{8} \times \underbrace{2_s \times 3_c \times 2_{q\bar{q}} \times n_f}_{\text{кварки}} \frac{\pi^2 T^4}{90} - \underbrace{B}_{\text{вакуум}}.$$

Для адронного вещества [25]:

$$p^H(T) = \underbrace{(3_{ISO})}_{\text{пионы}} + \underbrace{O(e^{-M/T})}_{\rho, \omega, \dots} \frac{\pi^2 T^4}{90}.$$

Сравнение этих выражений определяет критическую температуру  $T_c$  перехода КГП.

Как и привычная нам «электромагнитная» плазма (ЭМП), кварк-глюонная может быть идеальной при  $T \gg T_c$  и неидеальной при  $T \approx (1-3)T_c$ . Ответственный за это параметр неидеальности – отношение энергии межчастичного взаимодействия к кинетической энергии – в этом случае имеет вид  $\Gamma = 2Cg^2/4\pi aT = 1,5-5$ , где  $C$  – инвариант Казимира ( $C = 4/3$  для кварков,  $C = 3$  для глюонов),  $a \approx 0,5$  фм – межчастичное расстояние  $a \sim 1/T$ ,  $T = 200$  эВ,  $g \approx 2$  – константа сильного взаимодействия. Множитель 2 в числителе учитывает магнитное взаимодействие, которое в релятивистском случае того же порядка, что и кулоновское.

Сейчас трудно однозначно сказать, является ли переход к КГП истинным термодинамическим фазовым переходом со скачком плотности энергии, либо это резкий, но непрерывный переход [7]. Возможно (рис. 12.4 [7]), что при малых значениях барионной плотности  $\mu_B$ , – это непрерывная функция, а при больших  $\mu_B$  – фазовый переход первого рода (рис. 12.5). Во всяком случае теория [7] предсказывает в переходной области малое значение скорости звука (рис. 12.4, 12.3), что отражается в доступных для наблюдений гидро-

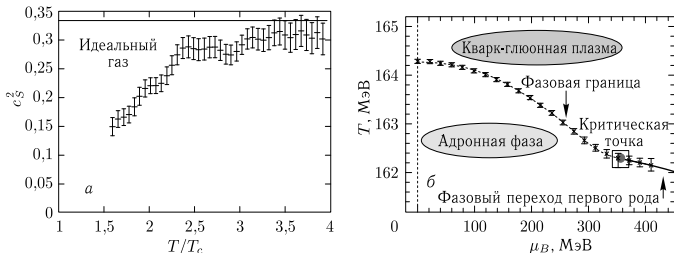


Рис. 12.4. Особенности уравнения состояния кварк-глюонной плазмы [7]. Слева — зависимость скорости звука от температуры. Справа — фазовая граница и критическая точка согласно [26, 27]

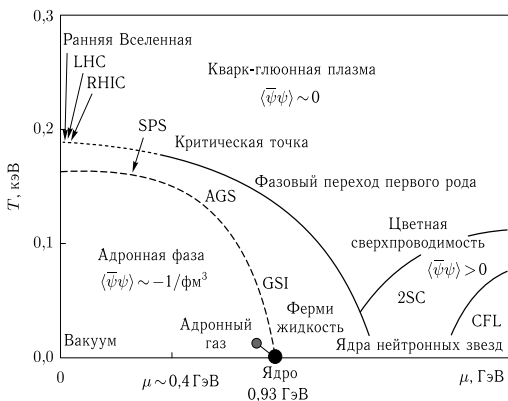


Рис. 12.5. Фазовая диаграмма кварк-глюонной плазмы [25, 28]

динамических аномалиях при релятивистских столкновениях тяжелых ядер. Указанные особенности адиабатической сжимаемости КПП свидетельствуют о более «мягком» ее уравнении состояния при  $T \approx T_c$  и более «жестком» при высоких температурах, а также при  $T \leq T_c$ . В пределе  $T \ll T_c$  уравнение состояния адронной материи становится более «мягким», хотя неопределенность здесь весьма высока, а описание такой материи методами квантовой электродинамики встречает значительные трудности.

Картина релятивистских столкновений тяжелых ядер приведена на рис. 12.6. В условиях эксперимента RHIC продольное лоренцевское сокращение размеров сталкивающихся ядер порядка 100. Характерный объем области

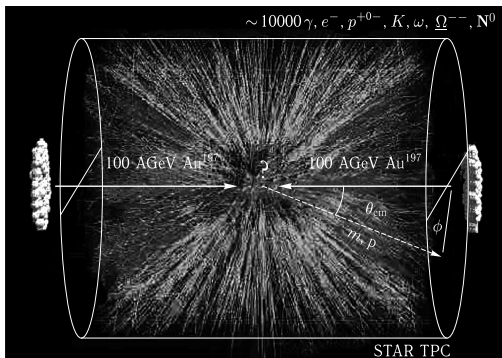


Рис. 12.6. Столкновение релятивистских адронов — «горение Вакуума» [29]

U + U столкновений составляет примерно  $3000 \text{ фм}^3$ , в нем содержится порядка 10000 кварков и глюонов, а характерное время столкновения  $\tau_0 \approx 0,2\text{--}2 \text{ фм}/c \approx (5\text{--}50) \cdot 10^{-25} \text{ с}$ . По этой причине часть высокоэнергетических процессов происходит, по-видимому, уже в разлетающемся веществе после того, как ядерные сгустки пролетели друг сквозь друга.

В работе [7] обращается внимание на то, что рождение быстрых частиц в разлетающейся плазме после ядерных столкновений аналогично рождению новых форм материи после Большого взрыва [6, 17]. Разница, однако, в том, что при ядерных столкновениях расширение одномерно, а не трехмерно, как в космологии. Пространственно-временная эволюция вещества после релятивистского столкновения представлена на рис. 12.7.

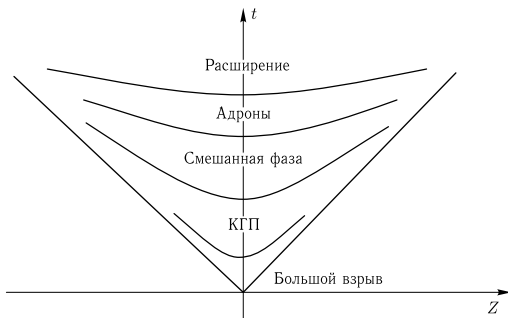


Рис. 12.7. Пространственно-временная эволюция вещества после столкновения [8]

Во время столкновения и по мере расширения и охлаждения ядерной материи возникающие кварки и глюоны термализуются (время  $\tau_{\text{eq}} \leq 1 \text{ фм/с} \approx 3 \cdot 10^{-24} \text{ с}$ ) и могут прийти в локальное термодинамическое равновесие за время жизни плазмы  $\tau_0 \approx (1 - 2)R/c \approx 10 \text{ фм/с}$ . В этом случае среда придет в гидродинамическое движение, фиксация которого несет экспериментальную информацию о свойствах адронного или кварк-глюонного вещества, а также о границах взаимного перехода, который согласно квантовой электродинамике должен происходить при плотности энергии порядка  $\text{ГэВ/фм}^3$ .

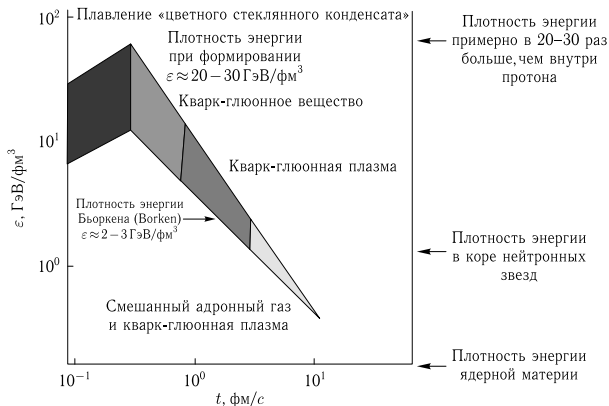


Рис. 12.8. Характерные плотности энергии при столкновении ядер в зависимости от времени взаимодействия [7]

Рисунок 12.8 [7] иллюстрирует характерные плотности энергии при ядерных столкновениях в зависимости от времени. Анализ динамики столкновения и разлета показывает [7], что переход от относительно медленного одномерного к более быстрому трехмерному расширению осуществляется за характерное время порядка  $0,3 \text{ фм/с}$ . Верхняя часть темной полосы на рис. 12.8 соответствует предположению, что система находится в термодинамическом равновесии и является идеальным безмассовым газом, а нижняя соответствует неравновесным «замороженным» условиям. Ко времени  $3 \text{ фм/с}$  плазма является смесью кварков, глюонов и адронов, а при  $10 \text{ фм/с}$  кварки и глюоны объединяются в адроны. Нижний предел достижимых плотностей энергии реализуется при  $t \approx 1 \text{ фм/с}$ , а верхний (безмассовый газ) — при  $0,3 \text{ фм/с}$ .

Общая оценка плотностей энергии имеет следующий вид [7]:

$$2-3 \text{ ГэВ/фм}^3 \leq E \leq 20-30 \text{ ГэВ/фм}^3.$$

Для сравнения, плотность энергии в нейтронных звездах [2] составляет примерно  $\text{ГэВ/фм}^3$ .

Возникновение новой формы материи — КГП — должно сопровождаться новыми физическими явлениями, проявляющимися в экспериментах.

Во-первых, появление новых степеней свободы в плазме должно отразиться на релятивистской гидродинамике столкновения и разлета, которая в свою очередь в условиях локального термодинамического равновесия описывается уравнениями вязкой жидкости. Этот формализм упрощается в случае невязкой жидкости (уравнение Эйлера), а экспериментальное проявление коллективных (вязких) эффектов может служить указанием на плазменные эффекты.

Вторым проявлением КГП является отличие рассчитанных по заданному уравнению состояния параметров гидродинамических явлений от эксперимента [6, 17].

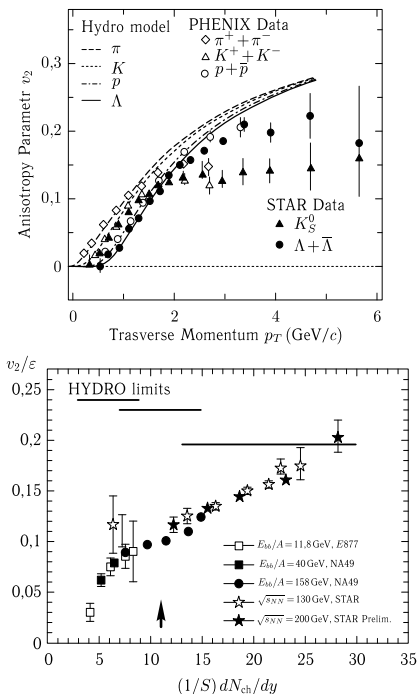


Рис. 12.9. Экспериментальное проявление кварк-глюонной плазмы [7]. Сверху — результаты измерений STAR [30–32] и FENIX [33]. Снизу — данные работы [34]

Результаты таких сопоставлений для азимутальных компонентов потока  $\pi$ ,  $K$ ,  $p$ ,  $\Lambda$  при Au + Au столкновениях, (200 АГэВ) приведены на рис. 12.9 [30–34]. Видно, что до плотности энергии порядка 1 ГэВ/фм<sup>3</sup> наблюдается хорошее соответствие расчетов и измерений, которое нарушается при больших энергиях. Это расхождение связывается с появлением КГП. Если учесть в уравнении состояния вызванное появлением этой плазмы уменьшение скорости звука в окрестности  $T \approx T_c$  и соответствующее «умягчение» уравнения состояния, то это улучшит соответствие расчетов и экспериментов.

Кроме особенностей в уравнении состояния появление КГП может проявляться в особенностях поведения вязкости в гидродинамическом движении.

Именно с этими эффектами связываются неустранимые в рамках трехмерной нестационарной (3+1D) гидродинамики занижения измеренных на SPS эллиптических скоростей разлета (рис. 12.10) по сравнению с расчетом и уменьшение этого отклонения с ростом прицельного [7] параметра столкновений, что вызвано меньшей эффективностью передачи давления гидродинамическому потоку андронами по сравнению с плазмой. Во всяком случае эксперименту лучше соответствуют (рис. 12.11) расчеты идеального-невязкого потока по уравнениям Эйлера [28], чем по уравнениям с вязкой диссипацией.

Любопытно, что при относительно невысоких энергиях эксперименты на RHIC показывают аномалии в диссипации КГП, давая значения эффективной вязкости до 10 раз меньше, чем это следует по моделям слабонеидеальной дебаевской плазмы. По-видимому [7], это связано с эффектами плазменной неидеальности.

Эффекты подавления струй, образующихся при релятивистском столкновении ядер, также содержат информацию о свойствах ударно-сжатого вещества [36–38] и о возникновении КГП. По порядку величины это подавление определяется радиационными потерями глюонов, в то время как вклад упругих потерь невелик.

Результаты такой «томографии» для экспериментов PHENIX приведены на правой части рис. 12.12 [7, 39] и показывают, что для объяснения наблюдаемого подавления струй начальная приведенная плотность глюонов должна быть равна  $dN^g/dy \approx 1000 \pm 200$ . Эти значения находятся в разумном соответствии с другим набором независимых измерений [7]:

А) со значениями начальной энтропии, определяемой по разлету плазмы после столкновения,

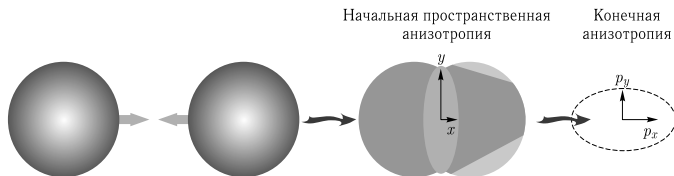


Рис. 12.10. Релятивистское столкновение ядер — порождение эллиптических потоков. Область высоких энергий имеет эллиптическую форму, так что пространственная анизотропия порождает и анизотропию импульсов разлетающейся среды [35]

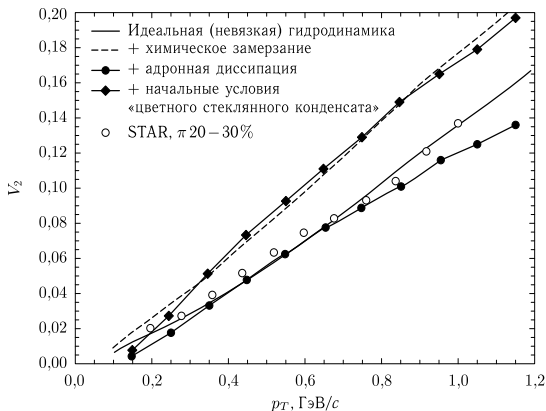


Рис. 12.11. Сопоставление измеренных (кружки) и рассчитанных скоростей разлета в ядерных столкновениях [28]

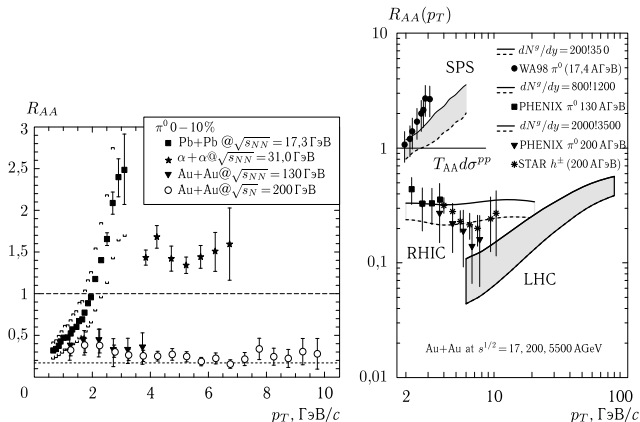


Рис. 12.12. Слева — результаты подавления потоков  $\pi^0$ , зарегистрированных на PHENIX, RHIC в сравнении с более ранними наблюдениями на ISR и SPS. Справа — результаты измерения на SPS, RHIC и LHC,  $R_{AA} = dN_{AA}/T_{aa}(b)d\sigma_{pp}$ , в сравнении с моделями радиационных энергопотерь [7, 39]

В) с начальными параметрами плазмы, следующими из гидродинамических расчетов «эллиптических» потоков,

С) с рассчитанными методами квантовой электродинамики значениями темпа изменения плотности.

Эти четыре набора данных дают возможность найти начальную плотность энергии при релятивистских столкновениях:

$$E_0 = E(1/\rho_0) \approx \rho_0^2/\pi R^2 \cdot dN^g/dy \approx 20 \text{ ГэВ/фм}^3 \approx 100E_a,$$

при характерном моменте глюона ( $\approx 1,0\text{--}1,4 \text{ ГэВ}$ ), который, в свою очередь, определяет время формирования,  $\hbar/p_0 \approx 0,2 \text{ фм/с}$ , первичной неравновесной КГП. В этих условиях необходимое для применения гидродинамики локальное термодинамическое равновесие наступает при

$$\tau_{\text{eq}} \approx (1\text{--}3)B/P_0 < 0,6 \text{ фм/с.}$$

К этому времени температура составит

$$T(\tau_{\text{eq}}) \approx (\varepsilon_0/(1\text{--}3) \cdot 12)^{1/4} \approx 2T_c.$$

По одной из моделей [7] при  $P_0 \approx 2\text{--}2,2 \text{ ГэВ}$  число мини-струй должно быть порядка 1000.

Более детальные данные о свойствах плазмы несет информация о фиксации коррелированных двойных струй при ядерных столкновениях [6, 17]. Соответствие характеристик этих струй, полученных в разных условиях (центральные и периферийные столкновения, протоны и золото), рассматривается [7] как существенный аргумент в пользу применимости методов квантовой хромодинамики и образования КГП.

Таким образом, наблюдаемые явления подавления струй при ядерных столкновениях дают возможность определять плотность энергии ядерного вещества и по анализу энергопотерь струй при их движении через кварк-глюонную плазму сделать выводы о сильном коллективном взаимодействии (неидеальности) такой плазмы.

Сейчас интенсивно анализируются наблюдательные проявления КГП [25], такие как:

- «барометрические» — по параметрам коллективных потоков (эллиптические, продольные, радиальные),
- «термодинамические» — фотоны, лептонные пары, векторные мезоны,
- «критические» явления — адронные флуктуации и плотности,
- «томография» — короткие джеты, потоки тяжелых кварков,
- «экзотика» — мультикварковые состояния, фемторазмерные «фуллерены».

Сигналы формирования кварк-глюонной плазмы включают тепловую эмиссию фотонов и лептонных пар, рождение  $J/\psi$ -частиц, рождение странных частиц, относительную множественность различного типа мезонов и барионов.

Из интересных гидродинамических явлений особенно отметим весьма элегантную и красивую идею Штокера [40] об образовании конических маховских ударных волн (рис. 12.13), по свойствам которых можно судить о характеристиках сжатого ядерного вещества.

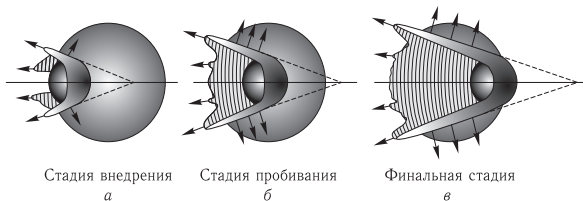


Рис. 12.13. Образование маховских ударных волн в ядерном веществе [40] при столкновении легкого ядра (слева) и «тяжелого»

Поиск и изучение физических свойств КГП является сейчас предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований во многих лабораториях мира. Эти работы получили новый импульс после ввода в действие Большого адронного коллайдера.

### 12.3. Аналогии между кварк-глюонной и электромагнитной плазмой

Между кварк-глюонной плазмой и обычной плазмой, из которой состоит (98–99) % видимой Вселенной и которая называется «электромагнитной» плазмой (ЭМП), много различий и много общего [8]. КГП отличается от ЭМП, в частности, тем, что в КГП нельзя пренебрегать наличием античастиц. При этом сохраняется не число частиц, а полное лептонное число. Плотность частиц больше не является адекватной характеристикой, на смену которой вводят плотность барионов и «странных» (strange) частиц.

В ЭМП большая разница масс электронов и ионов приводит к различной их динамике и кинетике, определяя, в частности, разницу электронных и ионных температур в релаксационных процессах. В КГП так же есть тяжелые («очарованные» (charm), верхние и нижние) частицы, число которых, однако, меньше, чем легких кварков и глюонов, и их время жизни короче. Поэтому вклад тяжелых кварков в динамику КГП мал. КГП описывается квантовой хромодинамикой, а ЭМП — квантовой электродинамикой. Последняя теория в отличие от хромодинамики является абелевой. В квантовой хромодинамике глюоны не только переносят цветовой заряд, определяя взаимодействия кварков между собой и с антикварками, но и взаимодействуют друг с другом. В отличие от фотонов, глюоны дают вклад в плотность цвета заряда и в цветовой ток.

Наиболее общая черта КГП и ЭМП состоит в коллективном характере межчастичного взаимодействия [8]. Радиус эффективного электромагнитного взаимодействия, несмотря на экранирование, обычно много больше межчастичного расстояния, так что в дебаевской сфере находится много частиц и их движение сильно коррелировано. Квантовая электродинамика дает соответствующее дебаевскому решение,  $\Phi(r) = (q/r) \cdot e^{-r/m_D}$ , в котором дебаевская масса (выполняющая роль обратного дебаевского радиуса в атомной системе

единиц)  $m_D^2 = g^2 T^2/3$ , порядка  $(gT)^2$ , где  $g$  — константа связи в квантовой хромодинамике. Так как в этой теории плотность частиц  $\sim T^3$ , то число частиц в сфере Дебая  $\sim 1/g^3$  в пределе слабой неидеальности ( $1/g \gg 1$ ). Интересно, что псевдопотенциал межчастичного взаимодействия одинаковых зарядов в КПП может в ряде случаев становиться притягивающим [8]. Характерный для ЭМП и КПП далекодействующий характер межчастичных взаимодействий приводит к важной роли коллективных эффектов, таких как экранирование, плазменные колебания, неустойчивость и т. п.

В отличие от опытов с ЭМП, где используются внешние электромагнитные или гравитационные поля, для КПП поля необходимой интенсивности трудно себе представить и при релятивистских столкновениях важны только самандуцированные поля.

Описание динамики ЭМП и КПП также имеют существенные отличия [8]. В электромагнитной плазме при соответствующих временных ограничениях широко используется ( $m_i \gg m_e$ ) двухжидкостная (электронно-ионная) модель с различными электронной и ионной температурами. Условие локальной электронной нейтральности препятствует заметному разделению зарядов, что приводит к уравнениям магнитной гидродинамики, где движение плазмы происходит под действием градиентов давления и магнитного поля.

В КПП нет такого магнитогидродинамического аналога, так как каждый кварк или глюон может нести разнополярные цветовые разряды. Поэтому по достижении локального термодинамического равновесия различные цветовые компоненты будут иметь одинаковые температуры и скорости. Кроме того, кварк-глюонная система становится нейтральной по цвету еще до достижения локального термодинамического равновесия. В случае КПП реализуется гидродинамика нейтральной жидкости без хромодинамических полей. Разумеется, в отсутствие локального термодинамического равновесия применяются более сложные кинетические уравнения с теми или иными формами «столкновительного» члена [7].

Для замыкания уравнений движения, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии, необходимо использовать уравнения состояния. Для простейшего случая идеального ультрарелятивистского газа безмассовых частиц принимают  $E_{(x)} = 3p(X)$ .

Многие типичные для ЭМП гидродинамические и кинетические плазменные неустойчивости, по-видимому, могут проявляться в КПП [8], хотя наблюдать их в этом случае крайне затруднительно. Однако с развитием этих возмущений связывают малое ( $\leq 1$  фм/с) измеренное время термализации КПП и эффект подавления струй при релятивистском столкновении ядер.

Наблюдаемая в экспериментах [8] быстрая термализация вещества, параметры эллиптических потоков, спектр вылетающих частиц, подавление струй и малая вязкость связывается [8] с неидеальностью КПП, находящейся недалеко от границы деконфайнмента. Приведенная выше оценка параметра неидеальности,  $\Gamma \approx 1,5-5,0$ , может быть на порядок больше из-за учета высших членов в потенциалах взаимодействия [8]. Это в свою очередь может вызвать «плазменный» фазовый переход, подобно тому, который наблюдается в нерелятивистской сильнонеидеальной плазме [41–45].

В работе [8] эффекты плазменной неидеальности, выявленные для сжатой ЭМП, использованы для анализа поведения вязкости, сечений столкновений и тормозной способности КГП. Поскольку в КГП отношение длины Ландау ( $\Gamma_c \sim q^2/E$ ) к дебаевскому радиусу изменяется от 1 до 5, это увеличивает сечение рассеяния в 2–9 раз, что снижает длину пробега  $\lambda$  и, следовательно, вязкость ( $\eta \sim \lambda$ ) тоже на порядок величины. Это соответствует измеренным параметрам эллиптических потоков и спектрам частиц при столкновении ядер, а также зафиксированному росту столкновительных потерь.

Любопытные аналогии [8] возникают между сильнонеидеальной КГП и сильнонеидеальной «пылевой» плазмой [42–44]. И в том, и в другом случае речь идет, по-видимому, о неньютоновской жидкости, где сдвиговая вязкость зависит от скорости движения. Кроме того, КГП обладает чертами наножидкости [8]. Так начальный размер КГП сразу после столкновения составляет примерно 10 фм, т. е. 20 межчастичных расстояний, что отличает

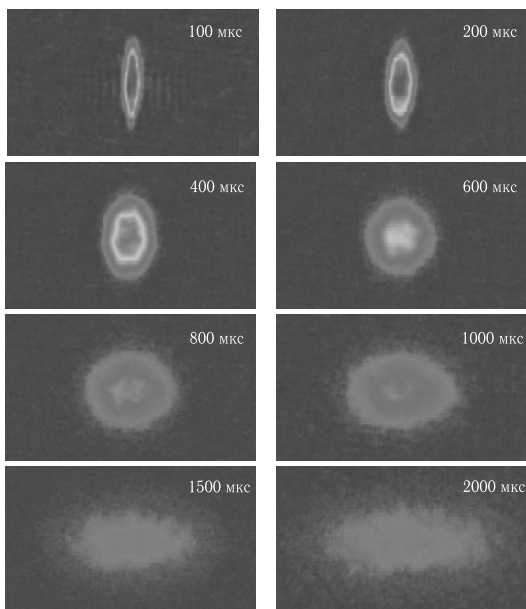


Рис. 12.14. Асимметричная («эллиптическая») динамика разлета неидеальной криогенной литиевой  ${}^6\text{Li}$  плазмы после выключения тока электростатической ловушки [46]. Аналогия с «эллиптическим» потоком при ядерных столкновениях

такую систему от сплошной среды. Это также характерно для неидеальной «пылевой» плазмы.

В работе [28] проанализированы аналогии между КПП и сильнонеидеальной ЭМП, состоящей из ионов в электростатических ловушках, охлажденных лазерным и испарительными методами до ультранизких температур. В обоих случаях речь идет о сильно взаимодействующих системах с ограниченным объемом и большим числом ( $\approx 10^4 - 10^7$ ) степеней свободы. На рис. 12.14 показан разлет плазменного облака криогенной ионной ЭМП [46], который носит выраженные черты «эллиптического» потока, типичного для разлета сверхплотного ядерного вещества в опытах по релятивистскому столкновению (рис. 12.10). Сходные энергетические характеристики нейтрального вещества и сверххолодных фермионных атомов (рис. 12.15) [47] демонстрируют поразительную аналогию при температурах, отличающихся примерно на 20 порядков величины.

Эти аналогии могут быть полезными и помочь в понимании ряда важных свойств КПП, особенно таких, которые трудно получить из прямого эксперимента с релятивистскими ионными столкновениями:

- распределение кинетической энергии в сжатой среде,
- коллективные движения и их меры,
- экранирование,
- столкновения и расширение,
- потоки, гидродинамика,
- термализация,
- корреляции,
- взаимодействие с быстрыми частицами, тормозная способность,
- вязкость, диссипация.

Такого рода аналогии легко продолжить.

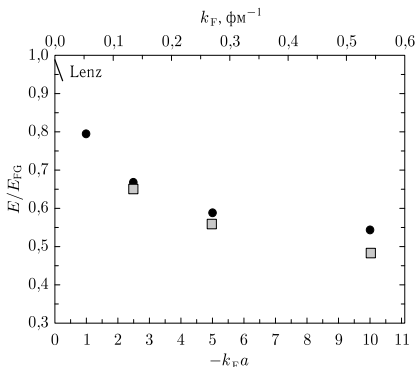


Рис. 12.15. Приведенная энергия нейтронного вещества (кружки) и ультрахолодного атома (квадратики) [47]

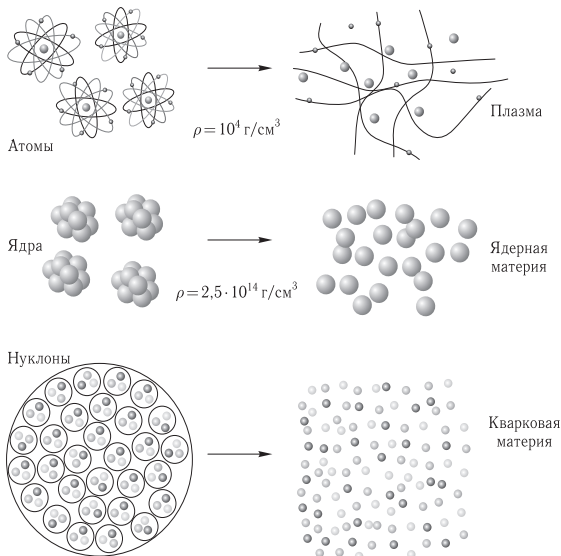


Рис. 12.16. Трансформация вещества при высоких плотностях энергии

В заключение приведем схему трансформации вещества [6, 17] при высоких плотностях энергии (рис. 12.16), которая в определенном смысле продолжает идею об упрощении вещества при движении в область экстремально высоких давлений и температур.

#### 12.4. Уравнение состояния кварк-глюонной плазмы

Для построения УРС необходимо знать массы кварков и параметры кварк-глюонной связи [2].

Массы легких кварков  $u$ ,  $d$  и  $s$  приведены в работе [48]:

$$m_u^{(c)} c^2 = (1,5-3,0) \text{ МэВ}, \quad m_d^{(c)} c^2 = (3-7) \text{ МэВ}, \quad m_s^{(c)} c^2 = (70-120) \text{ МэВ}.$$

Так как хипотенциал  $u$  и  $d$  кварков в кварковом веществе много больше  $m_u^{(c)} c^2$  и  $m_d^{(x)} c^2$ , эти кварки можно считать ультррелятивистскими и безмассовыми.

Нарушение аромат-симметрии предполагает присутствие электронов в электронейтральной кварковой плазме. Для построения УРС ищется термодинамическое равновесие в четырехкомпонентной плазме по отношению

к четырем термодинамическим переменным  $n_j$ , где  $j = u, d, s$  и  $e$ . Предполагается равновесие по процессам слабого взаимодействия [2]:

$$d \rightarrow u + e + \bar{\nu}_e, \quad u + e \rightarrow d + \nu_e, \quad (12.1)$$

$$u + d \rightarrow s + u, \quad s + u \rightarrow u + d. \quad (12.2)$$

Считая среду прозрачной для нейтрино, получим, что

$$\mu_d = \mu_u + \mu_e, \quad \mu_d = \mu_s. \quad (12.3)$$

Считая электроны свободными и ультрарелятивистскими, получим, что

$$\Omega_e = -\mu_e^4/[12\pi(\hbar c)^3]. \quad (12.4)$$

Для безмассовых невзаимодействующих кварков  $u$  и  $d$  цветовые степени свободы дают множитель 3:

$$\Omega_i^{(0)} = -\mu_i^4/[4\pi(\hbar c)^3], \quad \text{для } i = u, d. \quad (12.5)$$

В пределе слабой связи вклад кварков  $\Omega_q$  в  $\Omega$  может быть вычислен методами квантовой хромодинамики путем разложения по константе связи:  $\alpha_s = \frac{g_c^2}{4\pi}$ , где  $g_c$  — кварк-глюонная константа связи.

Формула для низшего порядка для ультрарелятивистских  $u$  и  $d$  кварков имеет вид

$$\Omega_i/\Omega_i^{(0)} = 1 - 2\alpha_s/\pi \quad \text{для } i = u, d. \quad (12.6)$$

Вклад массивных  $s$ -кварков [49] равен

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_s}{\Omega_s^{(0)}} = & \sqrt{1 - y_s^2} \left( 1 - \frac{5}{2}y_s^2 \right) + \frac{3}{2}y_s^4 L - \\ & - \frac{2\alpha_s}{\pi} \left[ 3 \left( \sqrt{1 - y_s^2} - y_s^2 L \right)^2 - 2(1 - y_s^2)^2 + 3y_s^4 (\ln y_s)^2 \right] - \\ & - \frac{\alpha_s}{\pi} \ln \left( \frac{\rho R}{\mu_s} \right) \left[ \sqrt{1 - y_s^2} - y_s^2 L \right], \quad (12.7) \end{aligned}$$

где  $y_s = m_s c^2/\mu_s$  и  $L = \ln\{(1 + \sqrt{1 - y_s^2})/y_s\}$ .

Из условия электронейтральности следует, что

$$\frac{1}{3}(n_u + n_d + n_s) = n_b, \quad n_e + \frac{1}{3}(n_d + n_s - 2n_u) = 0. \quad (12.8)$$

Решая систему (12.3) и (12.8), можно затем рассчитать УРС:

$$p(n_b) = -\Omega_e - \Omega_q, \quad (12.9)$$

$$\varepsilon(n_b) = \Omega + \sum_i n_i \mu_i = \Omega_e + \Omega_q + \sum_i n_i \mu_i, \quad (12.10)$$

где  $i = u, d, s$  и  $e$ .

Концентрация электронов в кварковой материи  $n_e/n_b$  стремится к нулю при  $m_s = 0$ , но быстро растет с ростом  $m_s$ . Приближенная формула для  $n_e/n_b$  приведена в [50] для  $\alpha_s \lesssim 0,2$ :

$$\frac{n_e}{n_b} \simeq \frac{0,002}{1-2\varepsilon} \left\{ 1 - \frac{4}{3}\varepsilon - 4\varepsilon \ln \left( \frac{2\mu_u}{\rho R} \right) \right\}^2 \left( \frac{n_0}{n_b} \right)^2 \left( \frac{m_s c^2}{200 \text{ МэВ}} \right)^6, \quad (12.11)$$

где  $\varepsilon = \alpha_s/\pi$ . В частности, это соотношение справедливо для невзаимодействующих кварков ( $\alpha_s \rightarrow 0$ ). При  $n_b \gg n_0$  и  $m_s c^2 \approx 200 \text{ МэВ}$  доля электронов мала ( $n_e/n_b \ll 10^{-3}$ ) и не влияет на УРС.

Используя теорию возмущений и процедуру ренормализации, в работах [51, 52] было получено однопараметрическое УРС:

$$\Omega_q^{(2)} = -p(\mu) = -\frac{3\mu^4}{4\pi^2(\hbar c)^3} (1 - 2\varepsilon - 3\varepsilon^2 \ln \varepsilon - 7,46\varepsilon^2), \quad (12.12)$$

где  $\varepsilon = \alpha_s(\mu)/\pi$ .

В работе [2] показано, что фазовый переход барионного вещества в кварковое является переходом первого рода, и он происходит, согласно [51], при  $\mu_b \approx (1-2) \text{ ГэВ}$  и  $\rho \approx 10^{15} \text{ г/см}^3$ . При этом сначала образуются [53] капли кваркового вещества, а скачок плотности может быть настолько велик, что может даже дестабилизировать звезду с ядром из такого конденсата [2].

Более деликатное утверждение состоит в том, что качественные явления типа конфайнмента и деконфайнмента не описываются теорией возмущений. Параметры разложения на границе перехода нельзя считать малыми.

Этого недостатка лишена решеточная модель [54], в которой поведение кварков определяется константой решетки  $B$ . Кварки при этом ограничены решеткой и не могут выйти за ее пределы. Эта модель дает значения массы мезонов и барионов, их магнитные моменты и термодинамику системы. В этой модели

$$\varepsilon_q = B + \varepsilon_q^{\text{kin}} + \varepsilon_q^{\text{int}}, \quad (12.13)$$

где  $\varepsilon_q^{\text{int}}$  рассчитывается методами теории возмущений. Давление имеет вид

$$p_q = -B + p_q^{\text{kin}} + p_q^{\text{int}}. \quad (12.14)$$

Полученные выражения содержат константу связи  $\alpha_s$  и массу странного кварка. В этой модели В-Q-переход является переходом первого рода с двукратным скачком барионной плотности и массовой плотности.

Сейчас ведутся споры, может ли КГП существовать в нейтронных звездах, которые стали бы «кварковыми» звездами. Эти астрофизические задачи, а также проблемы физики высоких энергий стимулируют разработку достаточно сложных моделей кварк-глюонной плазмы, обзор которых содержится в работе [2].

Обилие феноменологических моделей КГП в области  $\rho \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ г/см}^3$  отражает тот факт, что соответствующие энергии недостаточны для строгого применения методов квантовой хромодинамики, и мы здесь далеки от применимости принципа асимптотической свободы (работающего при  $\mu_f \gg 1 \text{ ГэВ}$ ).

Ввиду слабого взаимного притяжения кварков, КГП может быть сверхпроводящей [55–57]. Соответствующие пары образуют бозонный конденсат. Поскольку кварки несут цвет, то такое явление называется цветовой сверхпроводимостью [2]. Соответствующая щель  $\Delta \approx 100$  МэВ [56]. Однако влияние такой сверхпроводимости незначительно [2] и не превосходит нескольких процентов [58].

Описание фазового (B-Q)-перехода в КГП затруднено многими обстоятельствами. Обе фазы описываются существенно разными моделями. Одна из них применяется даже вне области ее справедливости. Кварковое вещество считается газом Ферми, в то время как в области перехода следует ожидать сильных корреляций. Есть и другие проблемы в описании фазовых переходов в КГП, которые сейчас интенсивно изучаются.

## 12.5. Нейтронная кристаллизация и странная материя

Кристаллизация нейтронного вещества вызвана сильным короткодействующим отталкиванием нейтронов, аппроксимированным потенциалом  $U_{ij} = \infty$ , при  $r_{ij} \leq r_{\text{core}}$ . Это происходит при  $n_b \sim \left(\frac{4\pi r_{\text{core}}}{3}\right)^{-1}$ , когда нейтроны оказываются локализованными в состоянии решетки. Первые оценки этого эффекта были сделаны по принципу соответственных состояний на основе данных по  ${}^3\text{He}$  [59]. Более развитые модели дали для этого перехода  $\rho \approx (5-30)10^{14}$  г/см<sup>3</sup> [60]. Эта оценка была затем заметно уточнена, и было выявлено, что область кристаллизации сдвигается в область  $\rho \gtrsim 3\rho_0$ , скачок плотности составляет 20%, а фазовый переход первого рода «умягчает» УРС. Обзор результатов по механическим свойствам нейтронных кристаллов содержится в работах [2, 61].

Странная материя возникает в области ультравысоких давлений, когда барионы теряют свою индивидуальность и переходят в квазисвободные  $u$ - и  $d$ -кварки. При столь высоких плотностях вещество сильно вырождено и температурные эффекты малосущественны. Обозначим давление деконфайнмента кварков в ядерном веществе  $p_D$ ; при давлении  $p > p_D$  барионная материя неустойчива по отношению к переходу к  $ud$ -плазме. Вместе с тем давление перехода может уменьшаться при превращении около половины  $d$ -кварков в  $s$ -кварки. Это превращение связано со слабым взаимодействием, в то время как превращение барионов в кварки относится к сильному взаимодействию. При экстраполяции  $ud$ - и  $uds$ -кваркового вещества к нормальным условиям,  $p \rightarrow 0$ , равновесная плазма состоит из ядер и не содержит свободных кварков. Действительно, основное состояние холодного «обычного» — это, например, кристалл  ${}^{56}\text{Fe}$  с  $E_0 \equiv \mu_b(p=0) = 930,4$  МэВ.

Гипотеза о странной материи соответствует ситуации, когда  $uds$ -вещество остается устойчивым даже при  $p = 0$ . Это предполагает то, что тяжелые капли  $uds$ -вещества с барионным числом  $A > A_{\text{min}} \gg 10$  имеют более низкую энергию на барион, чем  ${}^{56}\text{Fe}$ . В свою очередь, обычные тяжелые ядра становятся метастабильными по отношению к такой «странной» материи с временем жизни масштаба  $10^{100}$  лет [2]. Вместе с тем эксперимент показывает, что при

малых давлениях  $ud$ -вещество переходит по каналу сильного взаимодействия в ядра за время  $\tau \approx 10^{-22}$  с.

Следует иметь в виду, что странная материя не возникает в земных условиях. Она может возникнуть из состояния сверхсжатия — в ядрах нейтронных звезд, сверхновых или на ранних этапах развития Вселенной.

Идея странной матери получила развитие в работах [62–65], где рассматривались кварковые ядра, капли кварков и т.д. В работе [66] предложен космологический сценарий, по которому возникают кварковые «самородки» с одинаковым числом  $u$ -,  $d$ - и  $f$ -кварков. Они возникают в эпоху адронизации в ранней Вселенной спустя  $10^{-5}$  с после Большого Взрыва. Расчеты по решеточной модели показали, что часть  $uds$ -материи могла бы остаться в устойчивом состоянии при  $p = 0$ . Подобные результаты были получены затем в [49]. Сейчас производятся поиски проявлений странной материи в космических лучах и при релятивистском столкновении тяжелых ионов. (См. соответствующие работы [67–71].)

Сейчас предложены более сложные модели для описания странной материи [2, 48, 49, 72, 73], каждая из которых в той или иной форме допускает существование КГП при нормальных условиях.

Характерной особенностью УРС странной материи является отрицательное давление при  $p < p_s$ . В окрестности  $\rho \sim \rho_s$  справедливо линейное УРС  $p \sim (\rho - \rho_s)$ , которое следует также из решеточной модели [74] и других моделей странной материи.

Решеточная модель дает давление

$$p = ac^2(\rho - \rho_s), \quad (12.15)$$

где  $\rho_s$  слегка отличается от плотности  $\rho$  при  $p = 0$ . Такая форма УРС является точной для безмассовых или невзаимодействующих кварков, когда  $a = 1/3$ . Для  $m_s c^2 \lesssim 300$  МэВ и  $\alpha_c \leq 0,6$  и типичных плотностей для странных звезд, УРС (12.15) работает с погрешностью несколько процентов.

Параметры линейной модели УРС, следующие из других моделей, приведены в табл. 12.2 [2].

Таблица 12.2. Параметры  $a$  и  $\rho_s$  линейной модели УРС (12.15). Результаты SQM1 и SQM2 из работы [74]. Результаты SS1 и SS2 получены в работе [73]

Model EOS	$a$	$\rho_s, 10^{14}$ г/см <sup>3</sup>
SQM1	0,301	4,50
SQM2	0,324	3,06
SS1	0,463	11,54
SS2	0,455	13,32

Расчет показателя адиабаты странной материи,  $\gamma = \frac{n_b}{p} \left( \frac{dp}{dn_b} \right)$ , показывает резкое отличие этой величины от  $\gamma$  нейтронной материи, особенно при невысоких  $\rho$ . В области существования странной материи  $\gamma$  заметно больше  $4/3$ , даваемых теорией асимптотической свободы [2].

Считается [2], что основное состояние безмассовых кварков в асимптотической области слабого взаимодействия соответствует цветовой-ароматной сверхпроводимости. То же справедливо и для массовых  $s$ -кварков с  $m_s \lesssim 200 \text{ МэВ}/c^2$  и щелью  $\Delta \gtrsim 100 \text{ МэВ}$  [58]. В этом случае реализуется ароматно-симметричное кварковое вещество с  $n_u = n_d = n_s = n_b/3$  без электронных компонентов.

Показано [2], что сверхпроводимость увеличивает устойчивость странной материи. И хотя, в целом, влияние на УРС сверхпроводимости невелико при больших  $p$ , в области  $p \approx 0$  — это существенно для устойчивости странной фазы. Есть и другие гипотетические предсказания самосвязанной материи, существующей при  $p \approx 0$  [2].

Один из примеров [75–77] относится к сверхплотному пионному конденсату, приводящему к возможности образования аномальных ядер с большими значениями  $A$  и плотностями, значительно превосходящими  $\rho_0$ .

Идея об аномальных состояниях ядерной материи, предложенная в работах [63, 78], основана на модели сильно взаимодействующей ядерной материи, когда при высоких  $\rho \gtrsim 3 \div 5\rho_0$  нуклоны становятся безмассовыми. Этот результат следует из нелинейной модели скалярных мезонов (хиральная сигма-модель).

Другой механизм появления второго минимума на графике  $E(\rho)$  связан с коллективными возбуждениями спин-изоспинных мод в ядерном веществе, несущих квантовые числа пионов («пионная» конденсация). Это приводит ко второму минимуму на кривой зависимости барионной энергии от плотности, реализуемому при  $n_b > n_0$ , где  $n_0$  соответствует нормальному состоянию. Соответствующая энергия связи оказывается очень большой — сотни МэВ/нуклон ядра. Критика этой модели содержится в [79, 80].

Суперсимметричный вариант стандартной модели элементарных частиц допускает существование [81, 82] барионных Q-сфер. Они представляют собой макроскопические самосвязанные сверхплотные области, заполненные конденсатом скалярного поля с электрическим и барионным зарядами и рассматриваются как гипотетический компонент темной материи. При этом предполагается, что вещество Q-сферы имеет энергию меньшую, чем  ${}^{56}\text{Fe}$ . Если бы Q-вещество было реальностью, то происходил бы переход обычных нейтронных звезд в Q-звезды за  $10^7$ – $10^{11}$  лет [81, 82].

УРС Q-вещества предложено в работе [83], где для плотности перехода получено значение  $\rho(p=0) \equiv \rho_s = 10^{14} \text{ г}/\text{см}^3$ , а нижняя плотность существования Q-вещества в 3–5 раз меньше ядерной плотности.

Гипотезы об аномальной и Q-материи легли в основу работ по анализу возможных «странных» звезд, состоящих из этих экзотических типов материи [2, 50]. В отличие от нейтронных звезд, в этом случае на поверхности странных звезд реализуется чрезвычайно высокая плотность вещества,  $\rho \approx 10^{15} \text{ г}/\text{см}^3$ , а профиль плотности очень плоский — плотность в ядре только в 5 раз превышает плотность на поверхности (в то время как для нейтронных звезд эта разница составляет 14 порядков), а на границе звезды возникают сильные (до  $10^{18} \text{ В}/\text{см}$ ) электрические поля.

Закljučая эту главу, отметим, что двигаясь вверх по шкале плотностей вещества, по-существу, мы уже вплотную приблизились к границе современных представлений о физике высоких плотностей энергий и далеко оторвались от доступной для эксперимента области параметров. Это делает наши построения все менее надежными, но и все более интригующими, открывая дорогу эвристическим гипотезам и подходам самого экзотического характера.

### Список литературы

1. *Collins J. C., Perry M. J.* Superdense Matter: Neutrons or Asymptotically Free Quarks? // *Phys. Rev. Lett.* — 1975. — V. 34, No. 21. — P. 1353.
2. *Haensel P., Potekhin A. Y., Yakovlev D. G.* Neutron stars 1: Equation of state and structure. — N.Y.: Springer, 2007. — V. 326 of *Astrophysics and Space Science Library*.
3. *Гросс Д. Д., Политцер Х. Д., Вильчек Ф. А.* Нобелевские лекции по физике — 2004 // *УФН.* — 2005. — Т. 175, № 12. — С. 1305.
4. *Вильчек Ф. А.* Асимптотическая свобода: от парадоксов к парадигмам // *УФН.* — 2005. — Т. 175, № 12. — С. 1325.
5. *Yang C. N., Mills R. L.* Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance // *Phys. Rev.* — 1954. — V. 96. — P. 191.
6. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
7. *Gyulassy M., McLerran L.* New forms of QCD matter discovered at RHIC // *Nucl. Phys. A.* — 2005. — V. 750, № 1. — P. 30.
8. *Mrowczynski S., Thoma M. H.* What Do Electromagnetic Plasmas Tell Us about the Quark-Gluon Plasma? // *Annual Review of Nuclear and Particle Science.* — 2007. — V. 57, No. 1. — P. 61.
9. *Müller B.* The physics of the quark-gluon plasma. — Springer-Verlag, 1985.
10. *Райорден М., Зейц У.* Первые микросекунды // *В мире науки.* — 2006. — № 8. — С. 21.
11. *Hands S.* The phase diagram of QCD // *Journal of Contemporary Physics.* — 2001. — V. 42, No. 4. — P. 209.
12. *Новиков И. Д.* Отзвуки Большого взрыва (наблюдения реликтового излучения)(Сессия РАН 28.02.2001) // *УФН.* — 2001. — Т. 171, № 8. — С. 859.
13. *Rubakov V.* Introduction to Cosmology // *Proceedings of Science RTN(2005)003.* — 2005.
14. *Glendenning N.* Compact Stars, Nuclear Physics, Particle Physics and General Relativity. — N.Y.: Springer, 2000.
15. *Frontiers in High Energy Density Physics / Ed. by D. Henderson.* — Washington: National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
16. *Окунь Л.* Лептоны и кварки. — 2 изд. — М.: Наука, 1990.
17. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // *УФН.* — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653.
18. *Shuryak E. V.* Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter // *Phys. Rep.* — 1980. — V. 61, No. 2. — P. 71.
19. *Shuryak E. V.* Quark-gluon plasma and hadronic production of leptons, photons and pions // *Phys. Lett. B.* — 1978. — V. 78, No. 1. — P. 150.
20. *Kalashnikov O. K., Klimov V. V.* Phase transition in the quark-gluon plasma // *Physics Letters B.* — 1979. — V. 88, No. 3-4. — P. 328.
21. *Kapusta J. I.* Quantum chromodynamics at high temperature // *Nucl. Phys. B.* — 1979. — V. 88, No. 3-4. — P. 461.

22. *Baym G., Chin S. A.* Can a neutron star be a giant MIT bag? // *Phys. Lett. B.* — 1976. — V. 62, No. 2. — P. 241.
23. *Freedman B. A., McLerran L. D.* Fermions and gauge vector mesons at finite temperature and density. III. The ground-state energy of a relativistic quark gas // *Phys. Rev. D.* — 1977. — V. 16, No. 4. — P. 1169.
24. *Chapline G., Nauenberg M.* Asymptotic freedom and the baryon-quark phase transition // *Phys. Rev. D.* — 1977. — V. 16, No. 2. — P. 450.
25. *Gyulassy M.* Quark Gluon Plasmas: Femto Cosmology with A + A @ LHC. — Presented at the ExtreMe Matter Institute EMMI Kick-Off Meeting & Symposium. 2008. GSI, Darmstadt.
26. *Fodor Z., Katz S. D.* Critical point of QCD at finite T and  $\mu$ ; lattice results for physical quark masses // *Journal of High Energy Physics.* — 2004. — V. 2004, No. 04. — P. 050.
27. The QCD Equation of State at Finite  $T_\mu$  on the Lattice / *Csikor F., Egri G., Fodor Z. et al.* // *Prog. Theor. Phys. Supp.* — 2004. — No. 153. — P. 93.
28. *Baym G.* Matter under extreme conditions. — 2007.
29. *Langanke L.* A FAIR Chance for Nuclear Astrophysics, Symposium on the Physics at FAIR. — 2007.
30. Azimuthal Anisotropy at the Relativistic Heavy Ion Collider: The First and Fourth Harmonics / *Adams J., Adler C., Aggarwal M. M. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — V. 92, No. 6. — P. 062301.
31. *Sorensen P. R.* Kaon and Lambda Production at Intermediate  $P_T$ : Insights into the Hadronization of the Bulk Partonic Matter Created in Au + Au Collisions at RHIC. Ph.D. Thesis. — 2003.
32. Particle-Type Dependence of Azimuthal Anisotropy and Nuclear Modification of Particle Production in Au + Au Collisions at  $sNN = 200\text{ GeV}$  / *Adams J., Adler C., Aggarwal M. M. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — V. 92, No. 5. — P. 052302.
33. Elliptic Flow of Identified Hadrons in Au+Au Collisions at  $sNN=200\text{ GeV}$  / *Adler S. S., Afanasiev S., Aidala C. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — V. 91, No. 18. — P. 182301.
34. Directed and elliptic flow of charged pions and protons in  $Pb + Pb$  collisions at 4A and 158A GeV / *Alt C., Anticic T., Baatar B. et al.* // *Phys. Rev. C.* — 2003. — V. 68, No. 3. — P. 034903.
35. *Ollitrault J.-Y.* Anisotropy as a signature of transverse collective flow // *Phys. Rev. D.* — 1992. — V. 46, No. 1. — P. 229.
36. *Gyulassy M., Plumer M.* Jet quenching as a probe of dense matter // *Nucl. Phys. A.* — 1991. — V. 527. — P. 641.
37. High  $P_T$  probes of nuclear collisions / *M. Gyulassy M., Plumer M., Thoma M., Wang X. N.* // *Nucl. Phys. A.* — 1992. — V. 538. — P. 37.
38. *Wang X.-N., Gyulassy M.* Gluon shadowing and jet quenching in A + A collisions at  $\sqrt{s} = 200\text{ A GeV}$  // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — V. 68, No. 10. — P. 1480.
39. *Vitev I., Gyulassy M.* High -  $P_T$  Tomography of d+Au and Au+Au at SPS, RHIC, and LHC // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — V. 89, No. 25. — P. 252301.
40. Shock waves in nuclear matter — proof by circumstantial evidence / *Stocker H., Hofmann J., Maruhn J., Greiner W.* // *Progress in Particle and Nuclear Physics.* — 1980. — V. 4. — P. 133.
41. *Фортвов В.* Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества // УФН. — 2007. — Т. 177, № 4. — С. 347.
42. *Fortov V., Yakubov I., Khrapak A.* Physics of Strongly Coupled Plasma. — Oxford: Clarendon Press, 2006.

43. *Фортвов В., Храпак А., Якубов И.* Физика неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
44. Complex (Dusty) Plasma: Current Status, Open Issues, Perspectives / *Fortov V., Ivlev A., Khrapak S. et al.* // Phys. Rep. — 2005. — V. 421, No. 1. — P. 1.
45. Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropic Compression at Megabar Pressures / *Fortov V. E., Ilkaev R. I., Arinin V. A. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 2007. — V. 99, No. 18. — P. 185001.
46. Observation of a Strongly Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms / *O'Hara K. M., Hemmer S. L., Gehm M. E. et al.* // Science. — 2002. — V. 298, No. 5601. — P. 2179.
47. *Gezerlis A., Carlson J.* Strongly paired fermions: Cold atoms and neutron matter // Physical Review C (Nuclear Physics). — 2008. — V. 77, No. 3. — P. 032801.
48. *Yao W.-M. et al.* Review of particle physics // J. of Phys. G: Nucl. Part. Phys. — 2006. — V. 33. — P. 1.
49. *Farhi E., Jaffe R. L.* Strange matter // Phys. Rev. D. — 1984. — V. 30, No. 11. — P. 2379.
50. *Haensel P., Zdunik J., Schaeffer R.* Strange quark stars // Astron. Astrophys. — 1986. — V. 160. — P. 121.
51. *Baluni V.* Non-Abelian gauge theories of Fermi systems: Quantum-chromodynamic theory of highly condensed matter // Phys. Rev. D. — 1978. — V. 17, No. 8. — P. 2092.
52. *Freedman B. A., McLerran L. D.* Fermions and gauge vector mesons at finite temperature and density. III. The ground-state energy of a relativistic quark gas // Phys. Rev. D. — 1977. — V. 16, No. 4. — P. 1169.
53. *Morley P. D., Kislinger M. B.* Relativistic many-body theory, quantum chromodynamics, and neutron stars/supernova // Phys. Rep. — 1979. — V. 51. — P. 63.
54. New extended model of hadrons / *Chodos A., Jaffe R. L., Johnson K. et al.* // Phys. Rev. D. — 1974. — V. 9. — P. 3471.
55. *Barrois B.* Superconducting quark matter // Nucl. Phys. B. — 1977. — V. 129. — P. 390.
56. *Alford M., Rajagopal K., Wilczek F.* QCD at finite baryon density: nucleon droplets and color superconductivity // Phys. Lett. B. — 1998. — V. 422. — P. 247.
57. *Rajagopal K., Wilczek F.* The condensed matter physics of QCD // At the frontier of particle physics/Handbook of QCD / Ed. by M. Shifman. — World Scientific, 2000. — P. 2061.
58. *Rajagopal K., Wilczek F.* Enforced Electrical Neutrality of the Color-Flavor Locked Phase // Phys. Rev. Lett. — 2001. — V. 86, No. 16. — P. 3492.
59. *Anderson P. W., Palmer R. G.* Solidification pressure of nuclear and neutron star matter // Nature (Phys. Sci.). — 1971. — V. 231. — P. 145.
60. *Canuto V.* Equation of state at ultrahigh densities. Part 2 // Annu. Rev. Astron. Astrophys. — 1975. — V. 13. — P. 335.
61. *Owen B. J.* Maximum Elastic Deformations of Compact Stars with Exotic Equations of State // Phys. Rev. Lett. — 2005. — V. 95, No. 21. — P. 211101.
62. *Bodmer A. R.* Collapsed Nuclei // Phys. Rev. D. — 1971. — V. 4, No. 6. — P. 1601.
63. *Lee T. D., Wick G. C.* Vacuum stability and vacuum excitation in a spin-0 field theory // Phys. Rev. D. — 1974. — V. 9. — P. 2291.
64. Masses and other parameters of the light hadrons / *DeGrand T., Jaffe R. L., Johnson K., Kiskis J.* // Phys. Rev. D. — 1975. — V. 12, No. 7. — P. 2060.

65. *Chin S. A., Kerman A. K.* Possible Long-Lived Hyperstrange Multiquark Droplets // *Phys. Rev. Lett.* — 1979. — V. 43, No. 18. — P. 1292.
66. *Wiitten E.* Cosmic separation of phases // *Phys. Rev. D.* — 1984. — V. 30. — P. 272.
67. *Glendenning N. K.* Compact Stars: Nuclear Physics, Particle Physics, and General Relativity. — 2 edition. — New York: Springer, 2000.
68. *Madsen J.* Physics and astrophysics of strange quark matter // *Hadrons in Dense Matter and Hadrosynthesis* / Ed. by J. Cleymans. — Berlin: Springer, 1999. — P. 162.
69. Strange quark matter in physics and astrophysics / Ed. by J. Madsen, P. Haensel. — 1991. — V. 24 of *Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) B*.
70. *Weber F.* Pulsars as Astrophysical Laboratories for Nuclear and Particle Physics. — Bristol: IOP Publishing, 1999.
71. *Weber F.* Strange quark matter and compact stars // *Progress in Particle and Nuclear Physics.* — 2005. — V. 54. — P. 193.
72. *Wang Y., Chen D., Zhang X.* Calculated Equation of State of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 84, No. 15. — P. 3220.
73. Strange stars with realistic quark vector interaction and phenomenological density-dependent scalar potential / *Dey M., Bombaci I., Dey J. et al.* // *Phys. Lett. B.* — 1998. — V. 438, No. 123.
74. Innermost stable circular orbits around strange stars and kHz QPOs in low-mass X-ray binaries / *Zdunik J., Haensel P., Gondek-Rosinska D., Gourgoulhon E.* // *Astron. Astrophys.* — 2000. — V. 356. — P. 612.
75. *Migdal A. B.* Stability of vacuum and limiting fields // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1971. — V. 61. — P. 2209.
76. *Migdal A. B.* Phase transitions in nuclear matter and non-pair nuclear forces // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1972. — V. 63. — P. 1993–1999. — [Engl. transl.: *Sov. Phys. — JETP.* — V. 36. — P. 1052].
77. *Hartle J. B., Sawyer R. F., Scalapino D. J.* Pion condensed matter at high densities: equation of state and stellar models // *Astrophys. J.* — 1975. — V. 199. — P. 471.
78. *Lee T. D.* Abnormal nuclear states and vacuum excitation // *Rev. Mod. Phys.* — 1975. — V. 47, No. 2. — P. 267.
79. *Pandharipande V. R., Smith R. A.* Nuclear matter calculations with mean scalar fields // *Phys. Lett. B.* — 1975. — V. 59. — P. 15.
80. *Moszkowski S. A., Källman C. G.* Abnormal neutron star matter at ultrahigh densities // *Nucl. Phys. A.* — 1977. — V. 287. — P. 495.
81. Star wreck / *Kusenko A., Shaposhnikov M., Tinyakov P. G., Tkachev I. I.* // *Phys. Lett. B.* — 1998. — V. 423. — P. 104.
82. *Madsen J.* Detecting supersymmetric Q-balls with neutron stars // *Phys. Lett. B.* — 1998. — V. 435. — P. 125.
83. *Bahcall S., Lynn B. W., Selipsky S. B.* New models for neutron stars // *Astrophys. J.* — 1990. — V. 362. — P. 251.

**ПОЛУЭМПЕРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЯДЕРНОГО ВЕЩЕСТВА**

В изложении этой главы мы будем следовать работе [1]. Прежде всего отметим некоторую условность самого понятия «ядерного вещества», как бесконечной однородной системы, состоящей из нуклонов. На практике речь идет о ядрах с числом нуклонов до  $N \approx 300$ , для которых понятие ядерное вещество является аппроксимацией их внутренних областей. Протяженное ядерное вещество возникает, по-видимому, в нейтронных, кварковых звездах и на ранних стадиях Большого Взрыва.

Общий вид диаграммы ядерного вещества представлен на рис. 11.3, отдельные участки которой доступны для нейтронных, кварк-глюонных и странных звезд, а также в экспериментах по релятивистскому столкновению тяжелых ядер на ускорителях RHIC, LHC и FAIR GSI SIS300.

В ранних исследованиях ядерное вещество считалось несжимаемым. Однако данные по гигантскому монополюному резонансу (по сферически-симметричным колебаниям) дали первую информацию о сжимаемости ядер. Эти первые эксперименты дали скорость звука в ядерной материи  $c_s \approx 0,2c$ , а применение простейшей модели неидеального вещества ферми-газа подтвердили эти данные.

Опыты по столкновению тяжелых ядер позволяют осуществить глубокое сжатие ядерной материи с образованием ядерных ударных волн [2] в области энергий в единицы ГэВ/нуклон [3, 4].

Стоящие здесь «вечнозеленые проблемы» — наличие термодинамического равновесия в ударно-сжатой и разогретой ядерной плазме, а также применимость гидродинамического описания при числе сталкивающихся частиц  $\approx 500$  требуют постоянного нетривиального анализа. Первая проблема возникает из того факта, что при плотностях энергии 100–200 МэВ/нуклон длина пробега нуклона в ядре порядка 2–4 фм и возрастает с уменьшением энергии из-за принципа Паули. Это обстоятельство требует внимательного рассмотрения конкретных условий эксперимента.

Для ядер при нормальных условиях принято значение плотности  $\rho_0 \approx 0,15 \text{ фм}^{-3}$  и энергия связи на нуклон  $B_0 \approx -16 \text{ МэВ}$ . При  $\rho < \rho_0$  происходит фазовый переход к свободным нуклонам, а энергия  $E \sim \rho^{2/3}$ , как это следует из теории ферми-газа. Данные из исследования гигантского монополюного резонанса дают сжимаемость  $K \approx 200\text{--}400 \text{ МэВ}$  [5]. Данные из наблюдений взрыва сверхновых свойств нейтронных звезд и моделей Большого Взрыва могут дать информацию о УРС ядерного вещества, но это требует привлечения дополнительных соображений.

Результаты теорий сильного взаимодействия и квантовой хромодинамики дают полезную информацию для построения УРС ядерной материи.

Для описания кварк-глюонной плазмы (гл. 12) примем, что глюонный компонент считается бозонным газом с кратностью вырождения, равный 2 (для спина)  $\times 8$  (цвет), так что плотность энергии

$$\varepsilon_g = \frac{\pi^2 T^4}{30}.$$

Кратностью вырождения кварков и антикварков равной 2(спин) $\times 3$ (цвет) $\times 2$ (аромат). Тогда

$$\varepsilon_q + \varepsilon_{\bar{q}} = \frac{7\pi^2 T^4}{120} + \frac{\mu^2 T^2}{4} + \frac{\mu^4}{8\pi^2}.$$

Как мы видели в предыдущей главе, образование кварк-глюонной плазмы происходит при характерных плотностях энергии 2–3 ГэВ/фм<sup>3</sup>, в то время как типичная плотность энергии холодных ядер составляет примерно 150 МэВ/фм<sup>3</sup>.

### 13.1. «Холодные» составляющие

Согласно полуэмпирическому подходу к построению УРС (см. гл. 9), разделим термодинамические функции на потенциальную (или «холодную»  $T = 0$  К) и тепловую составляющие [1]:

$$W(\rho, s) = W_0(\rho) + W_{\text{th}}(\rho, s),$$

где  $W_0$  — вклад невзаимодействующих фермионов и бозонов, и куда включена энергия покоя нуклонов при равновесной плотности,  $W_{\text{th}} \approx 938$  МэВ.

Выражение для давления имеет вид

$$p(\rho, s) = \rho^2 \frac{\partial W_0}{\partial \rho} + \rho^2 \frac{\partial W_{\text{th}}}{\partial \rho} \Big|_s = p_0(\rho) + p_{\text{th}}(\rho, s).$$

Функция  $W_0(\rho)$  должна быть выбрана так, чтобы воспроизводить известные свойства атомного ядра. В равновесии  $W_0(\rho_0) = -B_0$  и  $\frac{\partial W_0}{\partial \rho} \Big|_{\rho_0} = 0$ , сжимаемость в точке равновесия,  $\rho = \rho_0$ , равна  $K = 9 \frac{\partial^2 W_0}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho_0}$ . В принципе  $W_0(\rho)$  должна обладать квадратичной асимптотикой при  $\rho \rightarrow 0$ , а система должна бы переходить в газ невзаимодействующих нуклонов. Однако при расширении ядерное вещество становится неустойчивым, при  $\rho \sim (1/3 - 1/2)\rho_0$ , и распадается на нуклоны и легкие ядра. Поэтому для описания этой области расширений применяются более детальные методы.

Другое ограничение на УРС диктуется принципом причинности. Скорость звука  $c_s^2 = \frac{\partial W_{(\rho, s)}}{\partial e} \Big|_s$ , в случае нулевой энтропии  $c_s^2 = \frac{dW_0(\rho)}{de}$ , где  $e$  — плотность энергии с учетом массы покоя.

Релятивистское условие  $c_s < c$  ( $c$  — скорость света) приводит к тому, что  $W_0(\rho)$  не может расти с  $\rho$  быстрее, чем пропорционально  $\rho$ . Это приводит

к квадратичному УРС [1] ( $x = \rho/\rho_0$ ):

$$W_0(x) = B_0 + \frac{K}{18}(x-1)^2, \quad p_0(x) = \frac{K}{9}\rho_0 x^2(x-1),$$

$$c_s^2 = \frac{2x(3x-2)}{18(mc^2 + B_0)/K + 3x^2 - 4x + 1}.$$

Данное УРС нарушает принцип причинности при  $x \gtrsim 5,2$ , при  $K = 210$  МэВ,  $B_0 = -16$  МэВ и  $mc^2 = 938$  МэВ.

Линеаризованное УРС имеет следующий вид:

$$W_0(x) = B_0 + \frac{K}{18x}(x-1)^2, \quad p_0(x) = \frac{K}{9}\rho_0(x-1),$$

$$c_s^2 = \frac{x}{9(mc^2 + B_0)/K + x - 1}.$$

УРС при правильном выборе параметров не нарушает условие причинности.

Гиперболическое УРС записывается в виде

$$W_0(x) = B_0 + \sqrt{\alpha^2(x-1)^2 + \beta^2} - \beta,$$

где  $\alpha$  — асимптотический наклон и  $\beta$  связано со сжимаемостью соотношением  $\beta = 9\alpha^2/K$ .

Сравнение энергий на нуклон для УРС ядерной материи приведено на рис. 13.1.

Простейшим приближением для описания тепловой части УРС является модель идеального газа:

$$p_{\text{th}} = \frac{2}{3}\rho E_{\text{th}}, \quad (13.1)$$

которое применяется для расчета невязкой гидродинамики ядерных столкновений и смесей адронов. Это уравнение справедливо не только для ферми-газа в пределе низких  $T$ , но в релятивистском случае годится для идеального газа всех  $T$ . Однако, когда температура приближается к 50 МэВ, в УРС надо учитывать образование пионов. В качестве первого шага надо вычислять интегралы Ферми для нуклонов и их возбужденных состояний (резонансы и т. п.) и интегралы Бозе для пионов и тяжелых мюонов (гл. 11). Соответствующие вычисления обычно настолько сложны, что соответствующие УРС вводятся в гидродинамические вычисления в табличной форме.

### 13.2. Температурные возбуждения

Выход за рамки приближения (13.1) осуществлен путем введения иного температурного вклада в полуэмпирические УРС, предложенного в работе [6]. В этой модели тепловой вклад является суммой энергии взаимодействия

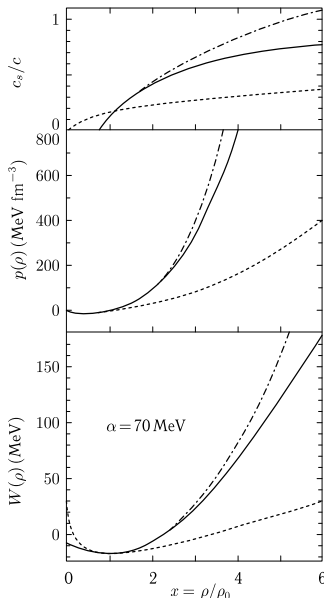


Рис. 13.1. Сравнение энергий на нуклон  $W$ , давления  $p$  и скорости звука  $c_s$  для гиперболического (сплошная линия), квадратичного (штрих-пунктирная линия) и линейного (пунктирная линия) уравнения состояния вещества при  $K = 210$  МэВ [1]

и кинетической энергии частиц. Последний из этих вкладов описывается релятивистским распределением Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна:

$$\begin{aligned}
 W = U + \sum_{i=1}^{\sigma_b} \left( \rho_i^0 m_i c^2 / \rho + \frac{4\pi g_i}{\rho (2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \frac{\varepsilon^2 \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4}}{\exp[\varepsilon/T] - 1} d\varepsilon \right) + \\
 + \sum_{i=\sigma_b+1}^{\sigma} \frac{4\pi g_i}{\rho (2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \frac{\varepsilon^2 \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4}}{\exp[(\varepsilon + U - \mu)/T] + 1} d\varepsilon, \quad (13.2)
 \end{aligned}$$

где первая сумма относится к степеням свободы бозе-пионов и тяжелым мезонам. Суммирование во втором члене производится по всем возбужденным состояниям нуклонов.  $\Delta(1232)$ -резонанс наиболее важен при энергиях порядка ГэВ/нуклон. При этом считается, что все резонансы имеют одинако-

вую энергию взаимодействия  $U$ , которая в свою очередь зависит от полной барионной плотности  $\rho$ . Ввиду химического теплового равновесия химические потенциалы нуклонов равны. Здесь  $\rho_i^0$  — вклад основного состояния бозе-частиц в плотность бозонной фазы.

Связь барионной плотности и химпотенциала имеет вид

$$\rho = \sum_{i=\sigma_b+1}^{\sigma} \frac{4\pi g_i}{(2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4}}{\exp[(\varepsilon + U - \mu)/T] + 1} d\varepsilon. \quad (13.3)$$

Число мезонов

$$N_i = g_i / \{ \exp(m_i c^2 / T) - 1 \} + \frac{4\pi g_i V}{(2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4}}{\exp[\varepsilon/T] - 1} d\varepsilon. \quad (13.4)$$

Связь  $U$  с энергией сжатия  $E_C$  при  $T \rightarrow 0$ , согласно выражению (13.3), имеет вид

$$(\mu - U)^2 = m^2 c^4 + (\rho C / g)^{2/3}, \quad (13.5)$$

где  $C = 6\pi^2 (\hbar c^3)$ . В том же пределе для выражения (13.2) мы получим

$$W(T=0) = 0,75X + U + \frac{m^2 c^4}{8} \left\{ \frac{3X}{X_1^2} - \frac{3m^2 c^4}{X_1^3} \ln[(X + X_1)/m c^2] \right\}, \quad (13.6)$$

где  $g = 4$ ,  $m c^2 = 939 \text{ МэВ}$ ,  $X = \sqrt{m^2 c^4 + X_1^2}$ ,  $X_1 = (\rho C / g)^{1/3}$ .

Предполагается, что для  $T = 0$  будет заселен только один уровень, что годится для малых плотностей. Разложение величин (13.5, 13.6) в пределе малых плотностей имеет вид:

$$\mu - U = m c^2 + \frac{1}{2} X_1^2 / m c^2 + \dots \quad (13.7)$$

$$W = U + m c^2 + 0,3(\rho/\rho_0)^{2/3} (\hbar^2/m) (6\pi^2 \rho_0/g)^{2/3} + \dots \quad (13.8)$$

Разница между точным выражением (13.6) и аппроксимацией (13.8) составляет около 1 МэВ при  $\rho/\rho_0 = 3$ . Окончательное выражение связи  $U$  и  $E_C$  имеет следующий вид:

$$U(\rho) = E_C + W_0 - 0,75X - \frac{m^2 c^4}{8} \left\{ \frac{3X}{X_1^2} - \frac{3m^2 c^4}{X_1^3} \ln[(X + X_1)/m c^2] \right\}, \quad (13.9)$$

Для давления получим следующее выражение:

$$p = -T \sum_{i=1}^{\sigma_b} \frac{4\pi g_i}{\rho (2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4} \ln(1 - \exp[-\varepsilon/T]) d\varepsilon +$$

$$+ T \sum_{i=\sigma_b+1}^{\sigma} \frac{4\pi g_i}{\rho(2\pi\hbar c)^3} \int_{m_i c^2}^{\infty} \varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - m_i^2 c^4} \ln(1 + \exp[(\mu - U - \varepsilon)/T]) d\varepsilon + \rho^2 \frac{\partial U}{\partial \rho}. \quad (13.10)$$

Энтропия на барион равна

$$S/N_B = p/(\rho T) - \frac{\rho}{T} \frac{\partial U}{\partial \rho} - \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{\sigma_b} g_i \ln(1 - \exp[-m_i c^2/T]) + (W - \mu)/T. \quad (13.11)$$

Эти упрощенные УРС могут быть использованы [6] для определения температуры ядерной материи из экспериментов по релятивистскому столкновению тяжелых ядер потоков пионов и каонов. Это в свою очередь может быть использовано как экспериментальная информация для проверки моделей уравнения состояния ядерной материи [6]. Обычно [6] для этого используются измеряемые в ядерных столкновениях выходы пионов, которые рождаются в сжатом и разогретом веществе. Соответствующая зависимость представлена на рис. 13.2–13.4 [6]. Виден резкий рост пионного выхода до  $T \approx 100$  МэВ, а затем его замедление из-за перехода ядерного вещества в адронную плазму. Это особенно хорошо видно на рис. 13.3, где показано распределение пионов по различным каналам. При низких  $T \approx 50$  МэВ и ниже большинство пионов находятся в состоянии бозе-конденсата с нулевым моментом. При больших  $T$  выход пионов обусловлен ядерными резонансами. Найденная из пионного выхода по этому УРС температура ядерной материи приведена на рис. 13.4.

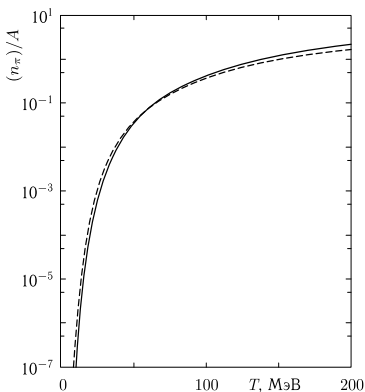


Рис. 13.2. Выход пионов в зависимости от температуры для барионной плотности в два раза большей (сплошная линия) и в четыре раза (пунктирная линия) большей плотности нормальной ядерной материи. Кривые описывают свойства горячей и плотной части бесконечной ядерной материи. Рис. из [6]

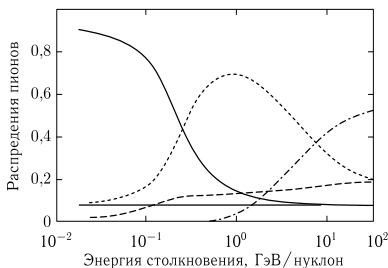


Рис. 13.3. Распределения пионов представлены для для реакции С+С. Точечная линия — дельта резонанс; пунктирная — свободный пионовый газ; сплошная — бозе-конденсат; штрих-пунктирная — сильные резонансы. Рис. из [6]

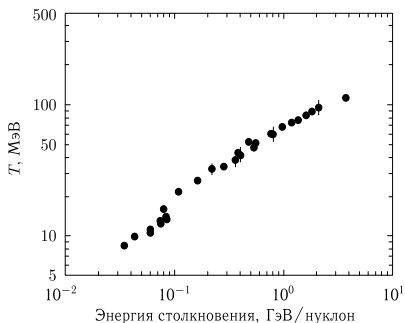


Рис. 13.4. Температура «вымораживания» (выхода) для пионов. Для  $E_{\text{лаб}} < 400$  МэВ/нуклон, выход пионов происходит при  $\rho_0 < \rho < 3\rho_0$ , для больших энергий — от двух до пяти  $\rho_0$ . Рис. из [6]

Упрощения УРС относятся к форме члена тепловой энергии [6]. Выход за рамки простейшего приближения (13.1) связан с учетом статистики Ферми [6] при  $T < T_F$ :

$$E_T(\rho, T) = \frac{\beta}{2} \rho^{-2/3} T^2 = \frac{S^2}{2\beta} \rho^{2/3} = E_T(\rho, S), \quad (13.12)$$

где

$$T = \left. \frac{\partial W}{\partial S} \right|_{\rho} = \frac{S}{\beta} \rho^{2/3}, \quad \beta = \left( \frac{g\pi}{6} \right)^{2/3} \frac{mc^2}{\hbar c}.$$

При более высоких  $T$ , как мы видели, существенны резонансы. Для тепловой энергии свободного идеального газа резонансов с массой  $m_i c^2$  имеем  $E_{T_i} = (3/2)T$ .

Энергия пиона [6] равна  $E_\pi = 1,85\rho_0 (T/m_\pi)^{9/2} m_\pi$ .

Давление сжатия равно  $p_c = \frac{K_0}{18\rho_0}(\rho^2 - \rho_0^2)$ , оно складывается с тепловым давлением (13.1). Зависимость (13.1) обобщается и на случай резонансов:  $p_T = \alpha(\rho, E_T)\rho E_T$ , где  $\alpha(\rho, E_T)$  учитывает их вклад.

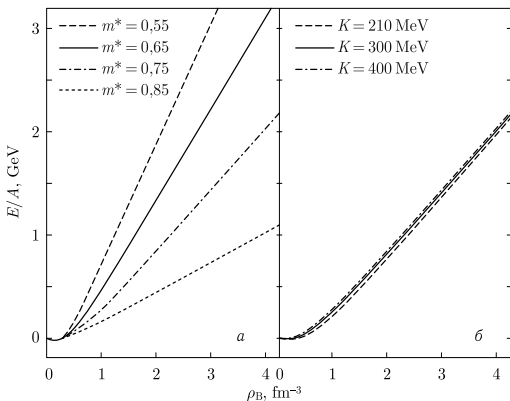


Рис. 13.5. [6]. Уравнение состояния, рассчитанное в рамках теории среднего поля: а) — для фиксированного значения  $K = 210$  МэВ и различных значений эффективной массы  $m^*$  при равновесной плотности:  $K(\rho_0) = 300$  МэВ; б) — то же для фиксированного  $m^* = 0,55$  и различных  $K$ :  $m^*(\rho_0) = 0,75m$

Особенность пионной диагностики уравнений состояния состоит в том, что пионы имеют большое сечение неупругого рассеяния и поэтому испытывают несколько циклов поглощения на ядерных резонансах, прежде чем вылетят из зоны реакции. Это снижает их чувствительность к процессам сжатия ядерной материи.

В отличие от пионов,  $K^+$ -мезоны обладают значительным пробегом в сжатом ядерном веществе. Более того, для типичных энергий ускорителей, BEVALAC, SIS,  $K^+$ -мезоны рождаются преимущественно в зоне высокого сжатия. Эти обстоятельства делают  $K^+$ -мезоны привлекательным диагностическим инструментом для диагностики УРС.

На рис. 13.5 представлены расчеты по УРС в рамках модели среднего поля (см. гл. 11) с  $K = 210$  МэВ при разных эффективных массах  $m^*$ . Интересно, что здесь не предполагается выделения потенциальной и тепловой части УРС.

### 13.3. Гидродинамика ядерных столкновений

Широкое применение полуэмпирических УРС лежит в сфере описания столкновения тяжелых ядер с релятивистскими скоростями. Сегодня это основной экспериментальный метод генерации рекордно высоких концентраций энергии, давления и температуры вещества в земных лабораторных условиях [3].

Рассмотрение релятивистских столкновений тяжелых ядер осуществляется в рамках гидродинамической модели [1–3]. Среда предполагается сплошной, находящейся в локальном термодинамическом равновесии и описываемой УРС. Используя обозначения [7], в системе центра масс 4-х вектор

$$x^\mu = \{x^0, x^1, x^2, x^3\} = \{ct, \mathbf{x}\} = \{ct, x^k\},$$

где греческие индексы меняются от 0 до 3, а латинские от 1 до 3. Четырехмерный градиент имеет вид  $\partial_\mu = \left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right\}$ .

Уравнение движения релятивистской гидродинамики следует из условий сохранения четырехмерного тока частиц,  $\partial_\mu j^\mu = 0$ , и тензора энергии-импульса,  $\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0$ .

Ток  $j^\mu$  определяется через плотность в покоящейся системе координат:  $j^\mu = nu^\mu/c$ , где  $u^\mu$  — скорость жидкости; она связана с обычной трехмерной скоростью  $\mathbf{v}$ :  $u^0 = \gamma$ ,  $u^i = \gamma v_i/c$ ;  $u_\mu u^\mu = 1$ . Релятивистский фактор  $\gamma$  равен  $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ .

Для совершенной жидкости [8]  $T^{\mu\nu} = (e + p)u^\mu u^\nu + p q^{\mu\nu}$ , где  $e$  — плотность энергии в покоящейся системе координат,  $p$  — давление.

Перепишем эти уравнения в привычной форме для лабораторной системы координат.

$$\text{Плотность энергии равна } E = T^{00} = \gamma^2(e + p) - p.$$

$$\text{Импульс равен } M_k = cT^{0k} = \gamma^2(e + p)v_k.$$

В лабораторной системе координат  $\rho = j^0/c = \gamma n$  и пространственная часть 4-тока равна  $j^k = \rho u^k = \gamma \rho v^k/c$ .

Используя эти обозначения, уравнения движения записываются в привычной форме:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0, & \partial_t \mathbf{M} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{M}) &= -\nabla p, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (\mathbf{v} E) &= -\nabla \cdot (\mathbf{v} p), & p &= p(n, e). \end{aligned}$$

Эти уравнения по форме совпадают с нерелятивистскими, но уравнение состояния записано в локальной, покоящейся системе координат. Процедура преобразований для этого случая представлена в работе [9].

Типичные результаты расчета релятивистских столкновений  $C + Au$  при 84 МэВ/нуклон приведены на рис. 13.6, 12.13. Хорошо видна область сжатия, распространение ядерных ударных волн и ударно-волновой маховский конус [2], а также струя ядерного вещества, вылетающая под углом к оси столкновений.

К настоящему времени установлено, что гидродинамическая модель дает разумные результаты при энергиях до примерно 2,1 ГэВ на нуклон.

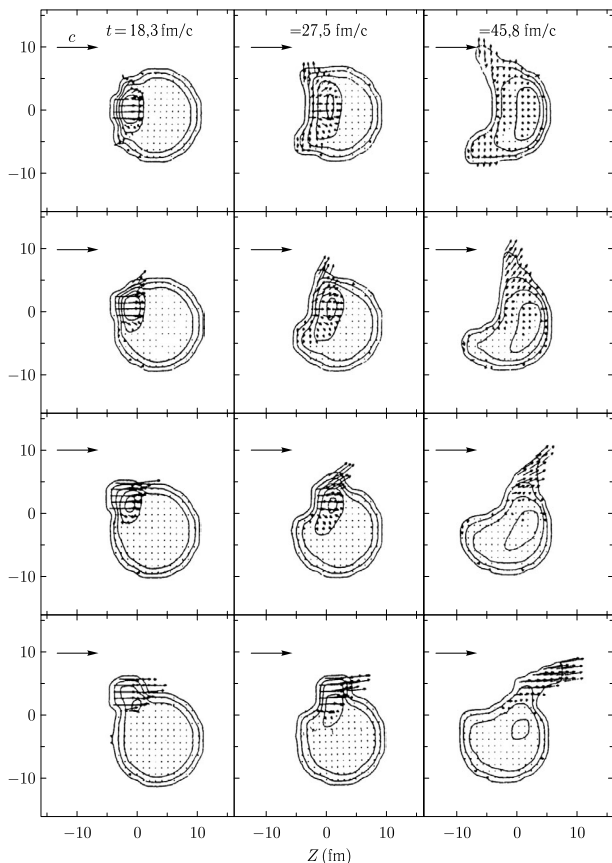


Рис. 13.6. Изолинии плотности. Гидродинамическое моделирование столкновений  $C + Au$  с энергией 84 МэВ на нуклон. Время увеличивается слева направо, прицельное расстояние — сверху вниз [2]

Сопоставление гидродинамических расчетов с экспериментом может дать информацию об УРС ядерного вещества и его параметрах [1].

Так в работах [10–12] данные об УРС были получены из измеренного выхода пионов [13], что позволило оценить  $W_0$  как функцию энергии удара,

используя одномерную модель ударного сжатия. В работе [14] установлено, что энергия сжатия оказывается почти одинаковой для линейного или квадратичного УРС, хотя плотности, оцениваемые с относительной погрешностью, примерно, 30%, заметно отличались. Использовались следующие упрощения.

1. Применима одномерная модель сжатия, а выход пионов определяется параметрами ударно-сжатой зоны.

2. Используется плавная зависимость внутренней энергии  $E$  от энергии удара  $E_c(E)$ , хотя эксперимент дает только малое количество дискретных и редких значений.

3. Тепловой вклад описывается формулами ферми-газа,  $p_T = (2/3)\rho E_{th}$ .

Используя  $W_0(E)$  как экспериментальную зависимость, можно найти  $\rho(E)$  и затем построить  $W_0(\rho)$ .

Рассмотрим одномерную задачу:

$$e(\rho, s) = \rho(m + W_0(\rho) + E_{th}(\rho, s)),$$

где  $\rho$  — плотность,  $s$  — энтропия, масса  $m$  — это масса нуклона минус энергия связи основного состояния; плотность энтальпии имеет вид

$$w(\rho, s) = e(\rho, s) + p(\rho, s),$$

где давление равно

$$p(\rho, s) = \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} (W_0(\rho) + E_{th}(\rho, s)) \Big|_s.$$

Уравнение Гюгоню [15] имеет вид

$$\frac{w_1^2}{\rho_1^2} - \frac{w_2^2}{\rho_2^2} + (p_2 - p_1) \left( \frac{w_1}{\rho_1^2} + \frac{w_2}{\rho_2^2} \right) = 0. \quad (13.13)$$

Для невозмущенных ядер имеем  $\rho_1 = \rho_0$ ,  $\rho_1 = 0$  и  $e_1 = w_1 = \rho m$ . Для зоны сжатого вещества  $\rho_2 = x\rho_1$ ,  $e_2 = \rho_2 E$ .

Учитывая выражение для энергии нерелятивистского газа Ферми, давление  $p_2$  можно записать следующим образом:

$$p_2 = \rho^2 \frac{dW_0(\rho)}{d\rho} + \frac{2}{3}\rho(E - W_0(\rho)).$$

С учетом (13.13) получим уравнение для  $W_0(\rho)$ :

$$\frac{dW_0(\rho)}{dx} = \frac{2}{3} \frac{W_0 - E}{x} + \frac{E(E + 2m)}{x[m(x - 1) - E]}, \quad (13.14)$$

Полученные результаты были аппроксимированы в работе [14]:

$$E(W) = 2,26W - 8,61 \text{ МэВ.}$$

Результаты расчетов приведены на рис. 13.7. Кривые были приближены к основному состоянию полиномом

$$W_0(x) = \frac{K}{18}(x - 1)^2 + A(x - 1)^3.$$

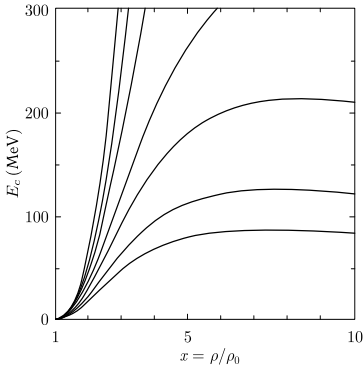


Рис. 13.7. Уравнения состояния, воспроизводящие экспериментальные данные в упрощенной модели. Кривые получаются из интегрирования уравнения (13.14) с квадратичным поведением  $W_0(x)$  в диапазоне плотностей ниже области экспериментальных данных [14]

На разработанное УРС накладываются дополнительные ограничения. Если кривая  $W_0(\rho)$  является слишком «мягкой», то она будет описывать экспериментальные данные только для малых энергий. Для «жесткой» части кривых должно выполняться условие причинности,  $c_s^2 = dW_0(\rho)/de < c^2$ .

### Список литературы

1. *Maruhn J. A.* The Nuclear Equation of State // High Pressure Equation of State: Theory and Applications. Course CXIII / Ed. by S. Eliezer, R. A. Ricci. — North Holland, 1991. — Proc. of the International School of Physics “Enrico Fermi”. — P. 507.
2. Shock waves in nuclear matter — proof by circumstantial evidence / *Stocker H., Hofmann J., Maruhn J., Greiner W.* // Progress in Particle and Nuclear Physics. — 1980. — V. 4. — P. 133.
3. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
4. *Фортов В. Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, №6. — С. 653.
5. *Blaizot J. P.* Nuclear compressibilities // Phys. Rep. — 1980. — V. 64, No. 4. — P. 171.
6. *Stöcker H., Greiner W.* High energy heavy ion collisions—probing the equation of state of highly excited hadronic matter // Phys. Rep. — 1986. — V. 137, No. 5–6. — P. 277.
7. Gravitation / *Misner C. W., Thorne K. S., Wheeler J. A., Chandrasekhar S.* // Phys. Today. — 1974. — V. 27, No. 8. — P. 47.
8. *Ландау Д.Л., Лившиц Е. М.* Теоретическая физика: Уч. пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. — 6-е изд. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006.
9. *Graebner G.*: Ph.D. thesis / University of Frankfurt. — 1985.

10. Pion production as a probe of the nuclear matter equation of state / *Harris J., Bock R., Brockmann R. et al.* // Phys. Lett. B. — 1985. — V. 153, No. 6. — P. 377.
11. Compression Effects in Relativistic Nucleus-Nucleus Collisions / *Stock R., Bock R., Brockman R. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 49. — P. 1236.
12. *Stock R.* Particle production in high energy nucleus-nucleus collisions // Phys. Rep. — 1986. — V. 135, No. 5. — P. 259.
13. Energy Dependence of Multi-Pion Production in High-Energy Nucleus-Nucleus Collisions / *Sandoval A., Stock R., Stelzer H. E. et al.* // Phys. Rev. Lett. — 1980. — V. 45. — P. 874.
14. *Hahn D., Stöcker H.* Temperatures in heavy-ion collisions from pion multiplicities // Nucl. Phys. A. — 1986. — V. 452, No. 4. — P. 723.
15. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — 3-е изд. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.

## Заключение

Великий Лагранж сказал, что в каждой науке ровно столько истины, сколько в ней математики. Уравнения состояния вещества как раз и являются строгим и компактным выражением физических и химических представлений на строгом математическом языке, давая возможность применить предельно общий аппарат математики к описанию конкретных объектов природы. При этом совершенство, изощренность, точность и широта описания разрабатываемых моделей уравнений состояния будут постоянно прогрессировать синхронно с успехами тех предметных научных дисциплин, для описания которых эти уравнения состояния создаются.

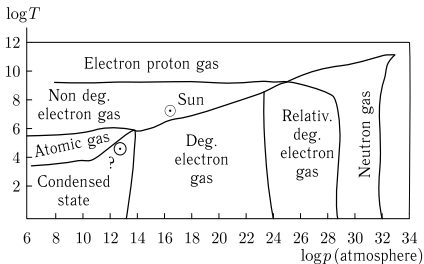


Рис. 1. Фазовая диаграмма вещества [1]

Мы закончим наше изложение фазовой диаграммой вещества в том виде, в каком она была нарисована рукой гениального Э. Ферми в 1953 г. (рис. 1 [1]) всего с одной «экспериментальной» точкой — Солнцем. Поразительно, как точно ему удалось предвидеть и задать будущие направления исследований на десятилетия вперед и как много нового удалось узнать и описать за столь короткий срок в этой увлекательной области.

Говоря о будущем науки об уравнениях состояния, вспомним основоположника этой науки Я. Д. Ван-дер-Ваальса, который в своей Нобелевской лекции 1910 г. говорил «Я никогда не мог считать, что последнее слово об уравнениях состояния уже сказано...»

## Список литературы

1. *Fermi E.* Notes on Thermodynamics and Statistics. — (1953). — Chicago, IL.: University of Chicago Press, 1966.

Научное издание

*ФОРТОВ Владимир Евгеньевич*

**УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА  
ОТ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА ДО КВАРК-ГЛЮОННОЙ ПЛАЗМЫ**

Редактор *М.Б. Козинцова*  
Оригинал-макет: *И.Г. Андреева*  
Оформление переплета: *Д.Б. Белуха*

Подписано в печать 28.12.2012. Формат 70×100/16. Бумага офсетная.  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 39,67. Уч.-изд. л. 43,64. Тираж 300 экз. Заказ №

Издательская фирма «Физико-математическая литература»  
МАИК «Наука/Интерпериодика»  
117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90  
E-mail: [fizmat@maik.ru](mailto:fizmat@maik.ru), [fmlsale@maik.ru](mailto:fmlsale@maik.ru);  
<http://www.fml.ru>

Отпечатано в ООО «Чебоксарская типография № 1»  
428019, г. Чебоксары, пр. И. Яковлева, 15  
Тел.: (8352) 28-77-98, 57-01-87  
Сайт: [www.volga-print.ru](http://www.volga-print.ru)

В.Е. Фортов

# УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

ОТ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА  
ДО КВАРК-ГЛЮОННОЙ ПЛАЗМЫ

