

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ В ПЛОТНОЙ ГЕЛИЕВОЙ ПЛАЗМЕ МЕТОДОМ ФЕЙНМАНОВСКИХ ИНТЕГРАЛОВ ПО ТРАЕКТОРИЯМ

*С. В. Шевкунов**

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 5 февраля 2010 г.

Исследована область равновесных состояний, где квантовая природа электронной компоненты и сильная неидеальность плазмы имеют решающее значение. В макроскопическом пределе найдено решение проблемы отрицательных знаков при вычислении равновесных средних в системе неразличимых квантовых частиц со спином. Продемонстрировано, что расчет может быть доведен до численного результата. Полный набор симметризованных базисных волновых функций построен на основе операторов симметрии Юнга. Проблема расчета комбинаторных весовых коэффициентов состояний, отвечающих различным графам сцепленных фейнмановских траекторий, в системах больших чисел частиц решена методом случайных блужданий по классам перестановок. Расчет кинетической энергии через вириальный эстиматор в условиях конечного давления осуществлен в статистическом ансамбле с подвижными границами. Компьютерное моделирование на основе развитых методик выполнено для плотной гелиевой плазмы в диапазоне температур от 30000 до 400000 К. Рассчитаны уравнение состояния, внутренняя энергия и степень ионизации, а также структурные характеристики плазмы в терминах пространственных корреляционных функций. Оценены параметры псевдопотенциальной модели плазмы.

1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Степень ионизации плазмы при температуре от нескольких до несколько десятков электронвольт и с плотностью, сравнимой с плотностью газов при нормальных условиях, сильно зависит от температуры и при ее варьировании в относительно узком диапазоне может меняться на порядок величины. Это обуславливает сильную зависимость теплофизических, электрических и спектроскопических свойств плазмы от внешних условий. Плазма этого типа является инструментом для целого ряда технологических приложений. В частности, такие условия реализуются в двойном электрическом слое в явлении взрывной электронной эмиссии. Взрывная эмиссия позволяет получить сильноточные низкоэнергетические пучки электронов и может инициироваться как в вакууме, так и в диоде, заполненном гелием [1–4]. Высокие значения напряженности электрического поля у поверхности катода и гигантские плотности тока

эмиссии достигаются в этих устройствах благодаря образованию двойного плазменного слоя. Двойной электрический слой в расширяющемся плазменном сгустке формируется из-за сильного различия в кинетике электронной и ионной компонент. Плазменный сгусток образуется в результате разогрева джоулевым теплом тока эмиссии с микронеровностей на поверхности катода. Микроструктура и взаимодействия между электронной и ионной компонентами на атомарном уровне играют в этих условиях ключевую роль [5].

В указанной области состояний давление в плазме измеряется тысячами атмосфер. Поэтому в технологических реализациях такая плазма существует в форме кратковременных ударных сгущений, время жизни которых определяется инерционностью релаксационных процессов и зависит от размеров неоднородности. Наибольшие времена жизни такой плазмы в земных условиях достигаются при подрыве атомного заряда. После остывания образовавшегося в центре взрыва плазменного сгустка до температуры ниже $5 \cdot 10^4$ К происходит восстановление электронных оболочек ионов и формирование

*E-mail: shevk54@mail.ru

плотной низкотемпературной плазмы, обладающей характерной сильной зависимостью свойств от температуры и дискретными линиями в спектрах излучения и поглощения.

Поскольку характерное время релаксации в электронной подсистеме на два порядка меньше, чем в ионной, ионизационно-рекомбинационное равновесие, отвечающее температуре разогрева, устанавливается раньше, чем произойдет разлет плазменного сгустка и уменьшение плотности плазмы. Здесь имеет место тот же эффект инерционного удержания, что и в экспериментах по управляемому термоядерному синтезу, однако при гораздо меньших температурах. Относительно низкая температура обеспечивает неполное разрушение оболочек ионов и сохранение дискретного спектра энергетических уровней. Это обстоятельство позволяет создать инверсную заселенность уровней и использовать такую плазму как рабочую среду для лазеров.

Частично ионизованные газы используются в качестве рабочей среды в лазерах с ядерной накачкой [6–10]. Существуют системы с газофазными радиоактивными источниками в виде тонкой фольги, размещаемой на стенках лазерной кюветы, системы на аэрозольном топливе, а также системы с накачкой медленными нейтронами, получаемыми от внешнего ядерного реактора. С помощью таких устройств решается проблема прямого преобразования ядерной энергии в энергию когерентного электромагнитного излучения [11–13], однако таким способом удастся построить лазеры, работающие только в инфракрасном и видимом диапазонах длин волн. Для получения коротковолнового когерентного излучения необходима высокая плотность энергии накачки, которая может быть получена только в условиях ядерного взрыва, превращающего лазерно-активную среду в плазму. В мощных импульсных установках однократного действия плотная термически ионизованная плазма в качестве рабочей среды лазера получается разогревом энергией ядерного взрыва с последующей накачкой лазерно-активного вещества за счет энергии осколков ядерных реакций деления, гамма-излучения или продуктов реакции термоядерного синтеза [14–17]. В таких устройствах возможно получение сверхмощных импульсов рентгеновского когерентного излучения. Плазма в качестве лазерно-активной среды должна содержать ионы, не лишенные своих электронных оболочек, т. е. существовать при относительно невысоких температурах. При этом ионы атомов гелия, имея массу, близкую к массе нейтронов, способны обеспечить

наиболее быстрое поглощение и передачу энергии от потока быстрых нейтронов, образующихся в термоядерной реакции, лазерно-активному веществу.

В экспериментах с подрывом ядерных зарядов на основе реакций деления изотопов плутония [18, 19] лазерно-активная среда получается быстрым разогревом до состояния плазмы специальных твердотельных стержней с последующим быстрым остыванием плазмы, сопровождающимся восстановлением электронных оболочек ионов. Остывающий плазменный сгусток не успевает изменить свою форму и плотность. В результате формируется относительно плотная плазма при температурах, измеряемых единицами электронвольт.

В отличие от условий высокотемпературной плазмы, реализуемых при термоядерном синтезе, теоретическое описание плазмы при температурах порядка нескольких электронвольт и плотностях, сравнимых с плотностью газов при нормальных условиях, сопряжено с необходимостью учета сильных пространственных корреляций и квантовых эффектов в электронной компоненте. Успех в теоретическом описании сильнонеидеальных систем квантовых частиц может быть достигнут на пути применения методов компьютерного моделирования подобно тому, как это произошло для систем, подчиняющихся классической статистике. Наиболее естественной для компьютерного моделирования оказывается предложенная в шестидесятые годы двадцатого века Фейнманом формулировка квантовой механики в терминах интегралов по траекториям [20]. На этой основе в сочетании с методом Монте-Карло расчета многомерных интегралов развивается современный теоретический подход, позволяющий единым образом *ab initio* исследовать компьютерными методами сильнонеидеальные системы квантовых частиц при конечных температурах. Наряду с количественными результатами, получаемыми методом интегралов по траекториям, самостоятельный интерес представляет совершенствование метода как такового.

Первые попытки применения метода интегралов по траекториям к исследованию плазмы относятся к середине семидесятых годов прошлого века [21–27]. В работах [28, 29] методом интегралов по траекториям исследована термическая устойчивость электронной оболочки атома водорода, в работах [30, 31] принципиально точная процедура включения в формализм интегралов по траекториям обменной симметрии с учетом спиновой переменной сформулирована для двухэлектронной системы, а в [32–35] она

распространена на общий случай многоэлектронных систем. Развитый метод применен для моделирования электронной пары в связи с проблемой электродов [36, 37], рассеяния позитронов на кластерах атомов гелия [38], термического разрушения электронной оболочки иона бериллия [39], плотной водородной плазмы [40–42] и плотного электронного газа [43, 44].

В настоящей работе методом интегралов по траекториям исследуется плотная гелиевая плазма в области параметров, отвечающей существенно квантовому характеру поведения электронной компоненты и сильной зависимости степени ионизации от температуры. Наряду с получением конкретных количественных результатов для плазмы оцениваются возможности применяемого подхода, анализируются его теоретические основания и направления совершенствования.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

2.1. Базисные функции

Плазма рассматривается как неупорядоченная система, состоящая из взаимодействующих ядер, несущих положительный заряд, и отрицательных электронов, находящихся в тепловом движении. Ядра трактуются как классические частицы, а электроны — как неразличимые квантовые частицы со спином $1/2$. Они описываются методами квантовой статистики в терминах интегралов по траекториям Фейнмана. На систему накладываются периодические граничные условия [45], или моделируется ячейка с подвижными границами, содержащая ядро и два электрона.

Равновесные средние должны вычисляться в представлении полного набора линейно независимых волновых функций. Процедура симметризации по перестановкам нарушает линейную независимость функций, однако, как можно показать [46], применение процедуры симметризации на основе операторов Юнга позволяет построить полный набор ортогональных симметризованных функций для неразличимых частиц со спином. Каждый оператор Юнга порождает базис неприводимого представления группы перестановок и соответствующее ему подпространство симметризованных функций. Объединение всех таких подпространств обладает полнотой, а их базисные функции взаимно ортогональны [46].

2.2. Спин и обмен

Хотя гамильтониан нерелятивистской системы непосредственно не действует на спиновые переменные, энергия системы существенно зависит от ее спинового состояния через перестановочную симметрию координатной части волновой функции. Неразличимость фермионов требует, чтобы полная волновая функция системы была антисимметричной по одновременной перестановке в паре спиновых и координатных переменных. При этом отдельно по спиновым и отдельно по координатным переменным волновая функция может обладать симметрией сложного типа, не сводящейся к простой симметрии или антисимметрии. Можно показать [46], что такому требованию удовлетворяют все функции в форме билинейных комбинаций спиновых и координатных функций, полученных симметризацией с помощью операторов Юнга со взаимно транспонированными схемами. В случае частиц со спином $1/2$ состоянию, являющемуся собственной функцией оператора квадрата спина, однозначно соответствует определенная схема Юнга спиновой части и дуальная ей схема Юнга координатной части волновой функции. Результат действия гамильтониана на координатные переменные существенно зависит от типа перестановочной симметрии координатной части, которая, в свою очередь, определяется спиновым состоянием системы.

2.3. Матричные элементы

Полная волновая функция системы N неразличимых квантовых частиц зависит от координатных $\{\mathbf{x}_i\}$ и спиновых $\{\sigma_i\}$ переменных. Собственная функция операторов координат, проекции спина и квадрата спина определяется соответствующими наборами собственных значений $\{\mathbf{r}_i\}$, $\{m_i\}$ и $S(S+1)$:

$$\psi(S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}). \quad (1)$$

Можно показать [32, 33], что суммирование диагональных элементов матрицы по собственным значениям $\{m_i\}$, $\{\mathbf{r}_i\}$, $S(S+1)$, не связанным перестановками \hat{P}_n в последовательностях $\{m_i\}$ и $\{\mathbf{r}_i\}$, приводит к статистической сумме вида

$$Z = \sum_S (2S+1) \sum_n W_S(\hat{P}_n) \times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (2)$$

где $W_S(\hat{P}_n)$ — комбинаторные коэффициенты. Следуя Фейнману [20], можно записать матричные эле-

менты $\langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle$ в (2) в виде континуальных интегралов по виртуальным траекториям $\tilde{R}(t)$ в $3N$ -мерном пространстве, соединяющим точки $R^{(1)} = \{\mathbf{r}_i\}$ и $R^{(n)} = \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\}$:

$$Z = \sum_S (2S + 1) \int dR \sum_n W_S(\hat{P}_n) \times \int_{R^{(1)}}^{R^{(n)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi\left(\left[\tilde{R}(t)\right]\right)\right) D\tilde{R}(t), \quad (3)$$

где $\Phi\left(\left[\tilde{R}(t)\right]\right)$ — функционал действия на траектории $\tilde{R}(t)$ с точностью до формальной замены времени t на мнимую обратную температуру: $t \rightarrow -i\hbar\beta$. Конец любой трехмерной виртуальной траектории $\mathbf{r}_i(t)$ является началом другой траектории — образуется кольцевая структура, топологически подобная графу перестановки \hat{P}_n [32, 33].

Континуальный интеграл определяется как предельный многомерный интеграл [20, 47]:

$$\int dR \int_{R^{(1)}}^{R^{(n)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi\left(\left[\tilde{R}(t)\right]\right)\right) D\tilde{R}(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{M m_0}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3NM/2} \int dR(1) \int dR(2) \dots \dots dR(M) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi(R(1), \dots, R(M))\right), \quad (4)$$

где

$$R(k) \equiv \{\mathbf{r}_i(k)\} = \tilde{R}(kt/M), \quad k = 1, 2, 3, \dots, M,$$

$$dR = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_M \equiv d^N r,$$

а действие $\Phi(R(1), R(2), \dots, R(M))$ вычисляется на ломаной, соединяющей точки $R(1), R(2), \dots, R(M)$.

2.4. Статистическая сумма

Полный набор линейно независимых симметризованных по перестановкам волновых функций строится записью полной волновой функции нерелятивистских частиц в виде билинейной комбинации спиновых $\chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\})$ и координатных $f_J^k(S, \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\})$ волновых функций, симметризованных юнговскими операторами со взаимно транспонированными схемами Юнга и различными n - и k -размещениями аргументов в клетках схем Юнга [48]. Суммируя диагональные матричные элементы

$$\int d^N r \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \hat{F} | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle = N! \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \hat{\chi}(S, \{m_i\}, \{\sigma_i\}) \times \sum_{n,k} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \int d^N r \int d^N x f(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \hat{F} f_J^k(S, \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \quad (5)$$

по $\{\mathbf{r}_i\}$ и $\{m_i\}$, не связанным перестановками, а также по S , получаем след оператора $\hat{F} = \exp(-\beta \hat{H})$, т. е. статистическую сумму системы [32, 33]:

$$Z = \sum_S (2S + 1) \left(\sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \hat{\chi}(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \sum_{nk} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \right) G(\hat{J}(S)) = \sum_S (2S + 1) \tilde{W}_S G(\hat{J}(S)), \quad (6)$$

где $\hat{J}(S)$ — операторы симметрии Юнга,

$$\tilde{W}_S = \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \hat{\chi}(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \sum_{nk} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \quad (7)$$

— весовые коэффициенты, а

$$G(\hat{P}_k) = \int d^N r \int d^N x f^*(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \times \hat{F} f(\{\mathbf{r}_i\}; \hat{P}_k \{\mathbf{x}_i\}). \quad (8)$$

Можно показать [32, 33], что статистическая сумма может быть записана в виде

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_S (2S + 1) \sum_n (-1)^{c(n)} \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} \times \times | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (9)$$

где индекс « S » у знака суммы означает, что суммирование проводится по всем перестановкам \hat{P}_n , содержащимся в операторе симметрии Юнга, отвечающем спину S , а $c(n)$ — сумма четностей перестановок в столбцах схемы Юнга. Каждой перестановке \hat{P}_n однозначно соответствует определенный ориентированный граф, состоящий из отдельных циклов, представляющих циклические перестановки. Редукция к немым (с нумерованными вершинами) графам осуществляется численно на компьютере: графы, отвечающие перестановкам одного и того

же класса, с графом-представителем данного класса $\hat{\Pi}_{\{\nu_i\}}$, где $\{\nu_i\} = \nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots, \nu_N$, а ν_i — количество циклов длиной i , группируются с общим множителем $\omega_S(\{\nu_i\})$:

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_S (2S + 1) \sum_{\{\nu_i\}} \omega_S(\{\nu_i\}) \times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_i\} \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\{\nu_i\}} \omega(\{\nu_i\}) \int d^N r \times \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (10)$$

где

$$\omega(\{\nu_i\}) = \sum_S (2S + 1) \omega_S(\{\nu_i\})$$

— сумма по всем спиновым состояниям.

Для численного расчета матричные элементы под знаком интеграла в выражении (10) записываются в форме интегралов по траекториям Фейнмана в их допредельной форме [20]. После этого статистическая сумма гелиевой плазмы, состоящей из N_n ядер, имеющих массу m_n , и $N = 2N_n$ электронов с массой m_e принимает вид

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{N_n!} \left(\frac{h^2}{2\pi m_n k_B T} \right)^{-3N_n/2} \times \frac{1}{N!} \left(\frac{m_e M}{2\pi \beta \hbar^2} \right)^{3MN/2} \sum_{\{\nu_i\}} \omega(\{\nu_i\}) \int_V \dots \int_V \exp \left\{ - \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{m_e M}{2\beta \hbar^2} (\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_k^{j-1})^2 - \frac{\beta}{M} \times \sum_{j=1}^M \left[- \sum_{k=1}^N e\varphi(\mathbf{r}_k^j) + \sum_{l < k=2}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l^j|} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|} \right] - \beta \left[\sum_{k=1}^{N_n} 2e\varphi(\mathbf{r}_k) + \sum_{l < k=2}^{N_n} \frac{4e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|} \right] \right\} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{N_n} d\mathbf{r}_1^1 \dots d\mathbf{r}_N^1 \dots \dots d\mathbf{r}_1^M \dots d\mathbf{r}_N^M. \quad (11)$$

Здесь и далее использовано обозначение $\mathbf{r}_k^j \equiv \mathbf{r}_k(j)$. В выражении (11) предполагается условие сцепления траекторий Фейнмана для электронов, $\mathbf{r}_k^0 = \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_k^M\}$, оператор $\hat{\Pi}_{\{\nu_i\}}$ проводит перестановку в ряду N упорядоченных элементов, $\{\mathbf{r}_k^M\} \equiv \mathbf{r}_1^M, \mathbf{r}_2^M, \dots, \mathbf{r}_N^M$, а $\{\nu_i\} \equiv \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N$ — многомерный индекс, задающий конкретное объединение

N траекторий в циклы (ν_i циклов длиной в i траекторий), e — элементарный заряд, $\varphi(\mathbf{r})$ — потенциал внешнего электрического поля, M — количество звеньев ломаной, представляющей фейнмановскую траекторию, \mathbf{r}_k^j — координата j -й вершины k -й траектории, \mathbf{r}_k — координата k -го ядра атома гелия. Суммирование в (13) проводится по всем вариантам сцепления нумерованных траекторий $\{\nu_i\}$ с условием $\sum_{i=1}^N i\nu_i = N$. Множитель

$$\left(\frac{h^2}{2\pi m_n k_B T} \right)^{-3N_n/2} = \Lambda_n^{-3N_n},$$

где Λ_n — тепловая длина волны ядер атомов гелия, представляет собой результат интегрирования по импульсам ядер.

2.5. Расчет равновесных средних

На основе статистической суммы в форме (11) получаются следующие выражения для канонических средних кинетической энергии электронной подсистемы [41],

$$\langle K \rangle = \frac{3}{2} M N k_B T - \left\langle \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{m_e M}{2\beta \hbar^2} (\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_k^{j-1})^2 \right\rangle, \quad (12)$$

потенциальной энергии плазмы при $\varphi(\mathbf{r}) = 0$,

$$\langle U \rangle = \left\langle \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{l < k=2}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l^{j-1}|} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|} \right] + \sum_{l < k=2}^{N_n} \frac{4e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|} \right\rangle, \quad (13)$$

и давления в плазме [42],

$$p = \frac{N_n k_B T}{V} + \frac{M N k_B T}{V} + \frac{1}{3V} \left\langle - \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{m_e M}{\beta^2 \hbar^2} (\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_k^{j-1})^2 - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[- \sum_{l < k=2}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l^j|} + \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|} \right] + \sum_{l < k=2}^{N_n} \frac{4e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|} \right\rangle, \quad (14)$$

где V — объем системы. Здесь и ниже $\langle \dots \rangle$ означает каноническое усреднение в пространстве координат

нат ядер $\{\mathbf{r}_l\}$, фейнмановских траекторий электронов $\{\mathbf{r}_k^j\}$ и различных способов их сцепления $\{\nu_i\}$ с функцией распределения

$$\begin{aligned} \rho(\{\mathbf{r}_k^j\}, \{\mathbf{r}_l\}, \{\nu_i\}; \beta) &\propto \\ &\propto \exp \left\{ - \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{m_e M}{2\beta\hbar^2} (\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_k^{j-1})^2 - \right. \\ &- \frac{\beta}{M} \sum_{i=1}^M \left[\sum_{l < k=2}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l^j|} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|} \right] - \\ &\left. - \beta \left[\sum_{l < k=2}^{N_n} \frac{4e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|} \right] \right\} \quad (15) \end{aligned}$$

и теми же условиями сцепления траекторий, что и в (11).

Нетрудно видеть, что в системах частиц с кулоновским взаимодействием, к которым относятся и гелиевая плазма, справедливо тождество

$$p = \frac{N_n k_B T}{V} + \frac{2}{3V} \left(\langle K \rangle + \frac{1}{2} \langle U \rangle \right). \quad (16)$$

В общем случае системы, состоящей из N квантовых и N_n классических частиц, с произвольным потенциалом $\varepsilon_{lk}(r)$ взаимодействия l -й и k -й квантовых частиц, потенциалом $E_{lk}^c(r)$ взаимодействия l -й и k -й классических частиц, потенциалом $\xi_{lk}(r)$ взаимодействия l -й классической и k -й квантовой частиц формула (16) принимает вид [42]

$$p = \frac{N_n k_B T}{V} + \frac{2}{3V} (\langle K \rangle - \langle K_{vir} \rangle), \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} K_{vir} &= \frac{1}{2M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{l < k=2}^N |\mathbf{r}_l^j - \mathbf{r}_k^j| \varepsilon'_{lk}(|\mathbf{r}_l^j - \mathbf{r}_k^j|) + \right. \\ &+ \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} |\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l| \xi'_{lk}(|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|) \left. \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\sum_{l < k=2}^{N_n} |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k| (E_{lk}^c)'(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k|) \right] \quad (18) \end{aligned}$$

— вириальный эстиматор, а штрихи означают производные по расстояниям между частицами. Только если отсутствуют границы ($p = 0$) и в системе нет свободных классических частиц или имеется только одна неподвижная классическая частица, из (20) следует $\langle K \rangle = \langle \tilde{K}_{vir} \rangle$ [42], где

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{vir} &= \frac{1}{2M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{l < k=2}^N |\mathbf{r}_l^j - \mathbf{r}_k^j| \varepsilon'_{lk}(|\mathbf{r}_l^j - \mathbf{r}_k^j|) \right] + \\ &+ \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} |\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l| \xi'_{lk}(|\mathbf{r}_k^j - \mathbf{r}_l|). \quad (19) \end{aligned}$$

Это означает, что расчет кинетической энергии через вириальный эстиматор (18) допустим только при нулевом давлении, т. е. в пространственно-неограниченных системах; но такие системы с конечными потенциалами взаимодействия при конечных температурах неустойчивы, а их статистические суммы расходятся. Поэтому, строго говоря, кинетическая энергия квантовых частиц должна рассчитываться через исходный эстиматор (12). Проблема состоит в расходимости дисперсии этого эстиматора и, как следствие, в росте флуктуационных погрешностей при больших M (при низких температурах).

В представленной работе для расчета кинетической энергии наряду с эстиматором (12) применялся альтернативный подход, основанный на использовании статистического ансамбля с подвижными границами. Из (17) видно, что кинетическая энергия квантовых частиц $\langle K \rangle$ может быть рассчитана через вириальный эстиматор $\langle K_{vir} \rangle$, если известно давление p в системе. Вместо расчета давления можно применить статистический ансамбль, в котором давление является входным параметром. В таком ансамбле объем системы не фиксирован, а флуктуирует в соответствии с равновесной функцией распределения. Расчет основан на полученном в работе [42] выражении для полной кинетической энергии трансляционного движения в смешанной системе квантовых и классических частиц в изотермо-изобарическом (NpT) статистическом ансамбле:

$$\langle K^{tot} \rangle_{NpT} = \langle K_{vir} \rangle_{NpT} + \frac{3}{2} (p \langle V \rangle_{NpT} - k_B T). \quad (20)$$

Для подсистемы квантовых частиц формула (20) принимает вид

$$\begin{aligned} \langle K \rangle_{NpT} &= \langle K_{vir} \rangle_{NpT} + \frac{3}{2} (p \langle V \rangle_{NpT} - k_B T) - \\ &- \frac{3}{2} N_n k_B T, \quad (21) \end{aligned}$$

где $\langle \dots \rangle_{NpT}$ означает усреднение в изотермо-изобарическом статистическом ансамбле с равновесной функцией распределения [49]

$$\begin{aligned} \rho(\{\mathbf{r}_i^j\}, \{\mathbf{r}_l\}, \{\nu_i\}; \beta, p) &\propto \\ &\propto \exp(-\beta p V) \rho(\{\mathbf{r}_i^j\}, \{\mathbf{r}_l\}, \{\nu_i\}; \beta). \quad (22) \end{aligned}$$

Из сравнения формул (17) и (21) видно, что переход из канонического в изотермо-изобарический статистический ансамбль с условием $V = \langle V \rangle_{NpT}$ сопровождается добавлением в кинетическую энергию слагаемого $k_B T/V$, которое является выражением известного эффекта неэквивалентности статистических ансамблей для немакроскопических систем [50].

Наряду с (12), формула (21) использовалась для расчета кинетической энергии там, где флуктуации (12) не позволяют получить надежные количественные данные. Подробный сравнительный анализ этих двух способов на примере водородной плазмы представлен в работе [42]. Численная проверка продемонстрировала хорошее количественное согласие между данными, полученными обоими методами.

Выполнены численные расчеты как для плазмы с периодическими граничными условиями, так и для отдельного атома гелия. В последнем случае, отвечающем ячейковой модели плазмы, ядро атома фиксировалось в центре сферической полости, объем которой V_{cell} флуктуировал в соответствии с равновесной функцией распределения. Давление p^* в этих условиях пересчитывалось к давлению в плазме в условиях нефиксированных ядер по формуле $p = p^* + k_B T / \langle V_{cell} \rangle_{NpT}$, справедливой для ячейковой модели плазмы. В ячейковой модели весь объем плазмы считается разделенным на ячейки с подвижными границами, причем в каждую ячейку помещается одно ядро атома гелия и два ближайших электрона. Внутри ячейки частицы взаимодействуют обычным образом и явно учитывается обмен. Прямое электростатическое взаимодействие и обмен между частицами, принадлежащими различным ячейкам, описываются в форме механического контакта между ячейками, методом изотермо-изобарического статистического ансамбля. Разница в свободной энергии Гельмгольца ΔF между макроскопическими системами объемом V , разбитым на $n \rightarrow \infty$ ячеек объемом $V_{cell}^i \equiv \eta_i V$ каждая с фиксированными и нефиксированными ядрами внутри них выражается, с учетом неразличимости частиц в ячейках, через статистическую сумму

$$Q_H = \frac{1}{n! \Lambda_{gr}^{3n}} \prod_{i=1}^n V_{cell}^i$$

движения групп частиц внутри макроскопического объема $V = \sum_{i=1}^n V_{cell}^i$:

$$\begin{aligned} \Delta F(n, V, \{\eta_i\}, T) &= -k_B T \ln Q_H = \\ &= k_B T \left[\ln(n! \Lambda_{gr}^{2n}) - \sum_{i=1}^n \ln \eta_i - n \ln V \right], \end{aligned} \quad (23)$$

где $\Lambda_{gr} = h / \sqrt{2\pi m_{gr} k_B T}$ — тепловая длина волны де Бройля группы частиц как целого, заключенных в ячейку, m_{gr} — ее масса. В соответствии с выражением (23) дополнительное давление в макроскопической системе, обусловленное движением ядер, не зависит от способа разбиения на ячейки $\{\eta_i\}$ и равно

$$p - p^* = -\frac{\partial \Delta F(n, V, \{\eta_i\}, T)}{\partial V} = \frac{nk_B T}{V}. \quad (24)$$

В условиях подвижных границ ячеек их средние объемы совпадают, $\langle V_{cell}^i \rangle_{NpT} \equiv \langle V_{cell} \rangle_{NpT}$, и (24) принимает вид

$$p - p^* = k_B T \frac{1}{\langle V_{cell} \rangle_{NpT}}, \quad (25)$$

где $\langle V_{cell} \rangle_{NpT} = V/n$ — средний объем ячейки в условиях нефиксированных ядер и давления p , а также фиксированных ядер и давления p^* в системе.

При моделировании с периодическими граничными условиями расчет электростатических взаимодействий проводился методом ближайшего образа [45]. Флуктуационные изменения объема ячейки периодичности сопровождалась пропорциональными масштабными преобразованиями текущих значений декартовых координат всех частиц и вершин виртуальных траекторий. Фактически проводится замена переменных, отвечающая переходу из пространства

$$\mathcal{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_n}, \mathbf{r}_1^1, \dots, \dots, \mathbf{r}_N^1, \dots, \mathbf{r}_1^M, \dots, \mathbf{r}_N^M, V)$$

в пространство переменных

$$\begin{aligned} \chi &= (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N_n}, \mathbf{x}_1^1, \dots, \mathbf{x}_N^1, \dots, \dots, \mathbf{x}_1^M, \dots, \mathbf{x}_N^M, V) \equiv \\ &\equiv \left(\frac{\mathbf{r}_1}{V^{1/3}}, \dots, \frac{\mathbf{r}_{N_n}}{V^{1/3}}, \frac{\mathbf{r}_1^1}{V^{1/3}}, \dots, \frac{\mathbf{r}_N^1}{V^{1/3}}, \dots, \dots, \frac{\mathbf{r}_1^M}{V^{1/3}}, \dots, \frac{\mathbf{r}_N^M}{V^{1/3}}, V \right). \end{aligned}$$

В χ -пространстве функция распределения (22) принимает вид

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}, V, \{\nu_i\}; \beta, p) &= \\ &= V^{N_n + MN} \rho(\{\mathbf{r}_k^j\}, \{\mathbf{r}_l\}, V, \{\nu_i\}; \beta, p) = \\ &= \exp \left\{ -\beta \left[pV + \Phi(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}, V, \{\nu_i\}; \beta, p) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (26)$$

где множитель $V^{N_n + MN}$ является якобианом перехода из \mathcal{R} -пространства в χ -пространство, а

$$\begin{aligned} \Phi(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}, V, \{\nu_i\}; \beta, p) \equiv & \\ \equiv V^{2/3} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} (\mathbf{x}_k^j - \mathbf{x}_k^{j-1})^2 - & \\ - \frac{N_n + MN}{\beta} \ln \left(\frac{V}{V_0} \right) + V^{-1/3} \times & \\ \times \left[\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{l < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{x}_k^j - \mathbf{x}_l^j|} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N_n} \frac{2e^2}{|\mathbf{x}_k^j - \mathbf{x}_l|} \right] + \right. & \\ \left. + \sum_{l < k=1}^{N_n} \frac{4e^2}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|} \right] \equiv V^{2/3} Q(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\nu_i\}) - & \\ - \frac{N_n + MN}{\beta} \ln \left(\frac{V}{V_0} \right) + V^{-1/3} U(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}) \quad (27) & \end{aligned}$$

с $V_0 = 1$. В численном моделировании марковского случайного процесса изменение объема системы, $V_a \rightarrow V_b$, за один шаг разыгрывалось с вероятностью

$$W(V_a, V_b) = \min \left(\frac{\tilde{\rho}(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}, V_b, \{\nu_i\}; \beta, p)}{\tilde{\rho}(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}, V_a, \{\nu_i\}; \beta, p)}, 1 \right),$$

для расчета которой требуется вычислить разность значений выражения (27) для двух значений объема:

$$\begin{aligned} \Delta\Phi = (V_b^{2/3} - V_a^{2/3})Q(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\nu_i\}; \beta) - & \\ - \frac{N_n + MN}{\beta} \ln \left(\frac{V_b}{V_a} \right) + & \\ + (V_b^{-1/3} - V_a^{-1/3})U(\{\mathbf{x}_k^j\}, \{\mathbf{x}_l\}). \quad (28) & \end{aligned}$$

Шаг по изменению объема при фиксированных $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N_n}, \mathbf{x}_1^1, \dots, \mathbf{x}_1^N, \dots, \mathbf{x}_1^M, \dots, \mathbf{x}_N^M$ фактически означает масштабное преобразование координат всех частиц и виртуальных траекторий в $(V_b/V_a)^{1/3}$ раз.

2.6. Суммирование диаграмм виртуальных траекторий

Численный расчет управляющих таблиц весовых коэффициентов $\omega(\{\nu_i\})$ прямым суммированием всех перестановок, содержащихся в операторе симметрии Юнга, возможен только для малых чисел частиц ($N < 10$), так как необходимый объем вычислений растет быстрее, чем $N!$. В работе [40] это ограничение снято заменой прямого суммирования по перестановкам расчетом в конечных случайных выборках. Осуществляется блуждание по классам перестановок. В каждом таком классе случайная равновероятная выборка перестановок проводится из множества всех перестановок \hat{P}_n с проверкой условия

их одновременной принадлежности данному классу $\{\nu_i\}$ и юнговскому оператору $\hat{J}(S)$. Перестановка, в зависимости от ее четности, получает весовой коэффициент $\sigma_{S, \{\nu_i\}}(n) = \sigma_S(n) = \pm 1$, если оба условия выполнены, и $\sigma_{S, \{\nu_i\}}(n) = 0$, если хотя бы одно из условий нарушено. Несмещенная оценка комбинаторного коэффициента $\omega_S(\{\nu_i\})$ равна

$$\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) = \frac{N!}{l} \sum_{k=1}^l \sigma_{S, \{\nu_i\}}(n_k), \quad (29)$$

где l — объем выборки $\{n_k\}$. Приближенность оценки (29) для $\omega_S(\{\nu_i\})$, полученной в конечной выборке $\{n_k\}$ на единственном шаге марковского процесса блужданий в пространстве фейнмановских траекторий, не означает приближенности процедуры расчета в целом, если она построена на комбинаторных весах $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ вместо $\omega_S(\{\nu_i\})$. Действительно,

$$\begin{aligned} \omega_S(\{\nu_i\}) &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^l \sigma_S(n_k) = \\ &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^l \sigma_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = \\ &= \frac{1}{(N!)^{2l-1}} \sum_{\{n_k\}} \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l), \quad (30) \end{aligned}$$

где $\{n_k\} = n_1, n_2, \dots, n_l$ — выборка l номеров из сплошного ряда целых чисел от 1 до $N!$, причем номера в ряду $\{n_k\}$ могут повторяться. После подстановки (30) в (10) и представления матричного элемента под знаком интеграла в виде произведения высокотемпературных матричных элементов статистическая сумма принимает вид

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{(N!)^{2l}} \sum_{\{\nu_i\}} \sum_{\{n_k\}} \sum_S (2S+1) \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) \times \\ &\times \int d^N r^1 d^N r^2 \dots d^N r^M \langle \{\mathbf{r}_i^M\} | \exp \left(-\frac{\beta \hat{H}}{M} \right) | \{\mathbf{r}_i^1\} \rangle \times \\ &\times \langle \{\mathbf{r}_i^1\} | \exp \left(-\frac{\beta \hat{H}}{M} \right) | \{\mathbf{r}_i^2\} \rangle \dots \\ &\dots \langle \{\mathbf{r}_i^{M-1}\} | \exp \left(-\frac{\beta \hat{H}}{M} \right) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{ \mathbf{r}_i^M \} \rangle. \quad (31) \end{aligned}$$

Выражение (31) является точным, несмотря на то что оно написано в терминах коэффициентов $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$, рассчитываемых в конечных выборках. Причина этого в том, что (31) охватыва-

Таблица. Список термодинамических состояний (pT -точек) водородной плазмы, для которых на рис. 6 изображены рассчитанные методом интегралов по траекториям радиальные распределения электронной плотности относительно ядра. Представлены приведенные к режиму нефиксированных ядер значения давления p [ГПа] = $p^* + k_B T \langle V \rangle_{NpT}^{-1}$

Номер кривой	T, K							
	30000 рис. 6а	40000 рис. 6б	60000 рис. 6в	80000 рис. 6г	100000 рис. 6д	140000 рис. 6е	200000 рис. 6ж	400000 рис. 6з
1	0.02120	0.36100	8.64	27.4	56.6	375.4	902.8	4244
2	0.00985	0.08980	2.49	10.7	19.3	187.0	456.9	2116
3	0.00437	0.02430	0.09240	2.27	6.53	94.1	228.0	1063
4	0.00087	0.00302	0.03870	0.825	1.60	49.7	110.6	529.4
5	—	0.00151	0.01890	0.2880	0.8080	23.2	55.6	261.0
6	—	0.00054	0.00834	0.1420	0.3820	10.9	27.7	131.8
7	—	—	0.00437	0.0678	0.2050	3.91	13.4	—
8	—	—	0.00210	0.0492	0.1350	2.73	6.53	—
9	—	—	—	0.0241	0.0977	1.34	3.38	—
10	—	—	—	0.0160	—	—	—	—

ет все такие выборки. Численный расчет канонических средних осуществляется блужданием в пространстве траекторий $\{\mathbf{r}_i^j\}$ и всех способов их сцепления $\{\nu_i\}$ с функцией распределения

$$\omega(x) = \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) a(\{\mathbf{r}_i^j\}, \{\nu_i\}, \beta) \sim \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) \exp \left\{ - \left[\frac{M m_e}{2 \beta \hbar^2} \times \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^M (\mathbf{r}_i^{j+1} - \mathbf{r}_i^j)^2 + \frac{\beta}{M} \sum_{j=1}^M V(\{\mathbf{r}_i^j\}) \right) \right] \right\}, \quad (32)$$

где $V(\{\mathbf{r}\})$ — оператор взаимодействия частиц.

2.7. Проблема отрицательных знаков

Проблема состоит в наличии среди комбинаторных коэффициентов $\omega(\{\nu_i\})$ как положительных, так и отрицательных величин. Полный набор линейно независимых симметризованных волновых функций системы неразличимых квантовых частиц со спином 1/2 строится действием операторов симметрии Юнга [46, 48]

$$\hat{J}(S) = (1 \pm \hat{n}_w)(1 \pm \hat{n}_v) \dots (1 \pm \hat{n}_c)(1 \pm \hat{n}_b)(1 \pm \hat{n}_a) \quad (33)$$

отдельно на координатные и спиновые части полной волновой функции, где $\hat{n}_a, \hat{n}_b, \hat{n}_c, \dots$ — операторы парных перестановок аргументов волновой функции с заданными номерами. Оператор (33) представляет собой последовательность операций симметризации $(1 + \hat{n})$ по строкам или антисимметризации $(1 - \hat{n})$ по столбцам схемы Юнга. Действие операторов $\hat{J}(S) = \sum_n \hat{N}_n$, где \hat{N}_n — операторы перестановки аргументов по номерам, получающиеся после раскрытия скобок в (33), на пространственные переменные $\{\mathbf{x}_i\} \equiv \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_N$ волновой функции равносильно действию обратных операторов

$$\begin{aligned} \hat{J}^{-1}(S) &= \sum_n \hat{N}_n^{-1} = \\ &= (1 \pm \hat{n}_a)(1 \pm \hat{n}_b)(1 \pm \hat{n}_c) \dots (1 \pm \hat{n}_w)(1 \pm \hat{n}_v) = \\ &= (1 \pm \hat{p}_a)(1 \pm \hat{p}_b)(1 \pm \hat{p}_c) \dots (1 \pm \hat{p}_w)(1 \pm \hat{p}_v) = \\ &= \sum_n \hat{P}_n \quad (34) \end{aligned}$$

на собственные значения $\{\mathbf{r}_i\} \equiv \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N$ координатной части волновой функции, где $\hat{p}_a, \hat{p}_b, \hat{p}_c, \dots$ — операторы парных перестановок собственных значений в заданных позициях, а $\hat{P}_n = \pm \hat{p}_s \hat{p}_t \hat{p}_u \dots$ — операторы перестановок в заданных

позициях, получающиеся раскрытием скобок в предпоследнем выражении в (34) [33].

Действие оператора симметрии на волновую функцию включает антисимметризацию по аргументам, стоящим в одном столбце. В случае неразличимых фермионов со спином 1/2 (электронов) схема Юнга оператора симметризации по перестановкам аргументов координатной части волновой функции состоит не более чем из двух столбцов [46, 48]. В системах, состоящих из трех и более электронов, по крайней мере в одном из столбцов окажется более одного аргумента, и хотя бы один оператор антисимметризации содержится в цепочке (33). Каждая операция антисимметризации по паре пространственных аргументов или по соответствующей ей паре собственных значений $(1 - \hat{p})$, стоящих в одном столбце схемы Юнга, порождает равные количества положительных и отрицательных перестановок \hat{P}_n в операторе $\hat{J}^{-1}(S)$:

$$(1 \pm \hat{p}_a) \dots (1 - \hat{p}) \dots (1 \pm \hat{p}_v) = [(1 \pm \hat{p}_a) \dots \dots (1 \pm \hat{p}_v)] - [(1 \pm \hat{p}_a) \dots \hat{p} \dots (1 \pm \hat{p}_v)], \quad (35)$$

и сумма комбинаторных коэффициентов, входящих в (2), оказывается равной нулю:

$$\sum_n W_S(\hat{P}_n) = \sum_{\{\nu_i\}} \omega_S(\{\nu_i\}) = 0. \quad (36)$$

Суммируя последнее равенство (36) по собственным значениям S оператора квадрата спина, получаем

$$\sum_{\{\nu_i\}} (2S + 1) \omega_S(\{\nu_i\}) = \sum_{\{\nu_i\}} \omega(\{\nu_i\}) = 0. \quad (37)$$

Сопоставление второго равенства в (37) с выражением для статистической суммы (10) показывает, что статистическая сумма имеет отличное от нуля значение только при условии, что матричные элементы

$$\langle \{\mathbf{r}_i\} | \langle \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{ \mathbf{r}_i \} \rangle, \quad (38)$$

отвечающие различным способам сцепления виртуальных траекторий, задаваемым операторами перестановки $\hat{\Pi}_{\{\nu_i\}}$, различаются по величине. Каждый такой матричный элемент характеризуется определенным графом сцепленных фейнмановских траекторий [33], а его значение является результатом интегрирования по ним. Основной вклад дают наиболее представительные траектории в форме клубков, занимающих область с пространственными размерами Λ_0 . В условиях слабых по сравнению с тепловой энергией $k_B T$ взаимодействий величина Λ_0 имеет порядок тепловой длины волны де Бройля электрона

$\Lambda_e = h / \sqrt{2\pi m_e k_B T}$ [49]. Из любых трех ближайших траекторий по крайней мере две относятся к одному и тому же столбцу схемы Юнга, и, следовательно, суммы комбинаторных коэффициентов в (37), отвечающих их сцеплению и расцеплению, равны по величине и противоположны по знаку. Если объем в расчете на один электрон области интегрирования много меньше Λ_0^3 , то среднее расстояние между соседними электронами оказывается того же порядка, что и среднее расстояние между началом и концом траектории в состоянии ее сцепления с другими траекториями. В этих условиях средняя длина соседних траекторий, находящихся в сцепленном состоянии и, значит, абсолютная величина их статистического веса мало отличаются от их средней длины и абсолютной величины статистического веса в несцепленном состоянии, причем статистические веса сцепленного и расцепленного состояний имеют противоположные знаки. Разности величин матричных элементов $\langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{ \mathbf{r}_i \} \rangle$, отвечающих сцепленному $\hat{P}_n = \hat{P}_+$ и расцепленному $\hat{P}_n = \hat{P}_-$ состояниям этих траекторий, согласно (37), взаимно компенсируются, и их результирующий вклад в статистическую сумму (10) оказывается исчезающе малым.

Взаимная компенсация положительных и отрицательных вкладов в статистическую сумму обеспечивает исключение из нее микросостояний, не удовлетворяющих условиям перестановочной симметрии. В сильновырожденных системах такая процедура исключения запрещенных состояний может при применении стохастических методов занять подавляющую часть вычислительных ресурсов. Значительно сократить вычислительные затраты удастся применением метода вытесняющего потенциала [40]. Метод сводится к добавлению во взаимодействие между неразличимыми частицами в функции распределения по микросостояниям некоторого непрерывно зависящего от пространственных переменных $\{\mathbf{r}_i^k\}$ эффективного поля $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$, которое приводит к существенному уменьшению частоты посещения запрещенных микросостояний в процессе случайных блужданий и, таким образом, уменьшает вычислительные затраты. Функциональный вид поля $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$ и детали вычислительной процедуры представлены ранее [40].

Метод вытесняющего потенциала в значительной степени решает проблему отрицательных знаков. Однако в системах с большим количеством частиц из-за перераспределения объема конфигурационного пространства в пользу запрещенных состояний он теряет свою эффективность. Действительно, если в объеме V системы область разрешенных со-

стояний оценивается объемом $V_+ = V - V_0$, то доля разрешенных состояний в статистической сумме N электронов оценивается отношением конфигурационных объемов, $\theta_+ \sim (V_+/V)^N$. В макроскопическом пределе $N \rightarrow \infty$ относительный объем конфигурационного пространства разрешенных состояний становится исчезающе малым $\theta_+ \rightarrow 0$, а относительный объем запрещенных состояний, наоборот, растет, $\theta_0 = 1 - \theta_+ \rightarrow 1$. Подавляющая доля вычислительных ресурсов расходуется на блуждание по запрещенным состояниям, которые не дают вклада в равновесные средние. По этой причине в области больших N метод блуждания по диаграммам сцепленных траекторий даже в сочетании с методом вытесняющего потенциала в его исходной формулировке становится неэффективным. Ниже представлен модифицированный метод, сохраняющий свою работоспособность и в области больших чисел частиц.

В области больших N относительные флуктуации в системе нивелируются. Это позволяет исключить суммирование по графам сцепленных траекторий и связанные с этим проблемы знакопеременных вкладов в статистическую сумму. В работе [35] выполнен анализ зависимости комбинаторных весовых коэффициентов $\omega(\{\nu_i\})$ от степени связности

$$\alpha_c(\{\kappa_i\}) = \frac{N}{N-1} \left(1 - \sum_{i=1}^N \frac{\kappa_i}{i} \right) \quad (39)$$

графов сцепленных траекторий, где интенсивная величина $\kappa_i = i\nu_i/N$ равна относительному количеству траекторий, входящих в циклы длиной i .

Минимальное абсолютное значение $\omega(\alpha_c)$ отвечает полностью расцепленным траекториям ($\kappa_1 = 1, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = 0, \dots, \kappa_N = 0; \alpha_c = 0$). С ростом степени связности α_c абсолютные значения $\omega(\alpha_c)$ растут, достигая максимума для графа, в котором все N траекторий сцеплены в единый цикл ($\kappa_1 = 0, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = 0, \dots, \kappa_N = 1; \alpha_c = 1$), при этом существуют две симметричные ветви положительных и отрицательных комбинаторных коэффициентов. Знак $\omega(\alpha_c(\{\kappa_i\}))$, где $\{\kappa_i\} = \kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_N$, меняется при добавлении или изъятии уже только одного оператора парной перестановки, содержащегося в $\hat{P}_{\{\nu_i\}}$, т. е. при изменении связности соответствующего графа на величину порядка $\Delta\alpha_c = 1/N$. В макроскопическом пределе $N \rightarrow \infty$ разница в связности соседних по α_c графов, имеющих противоположные знаки, нивелируется, $\Delta\alpha_c \rightarrow 0$, параметр α_c становится непрерывно меняющейся переменной и одному значению α_c отвечают два значения $\omega(\alpha_c)$ — одно положительное $\omega(\alpha_c) = \omega^+(\alpha_c)$ и одно отрицательное

$\omega(\alpha_c) = \omega^-(\alpha_c)$. В соответствии с этим существуют две ветви функции распределения

$$\rho^\pm(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) \propto \xi(\alpha_c) \sum_k \omega(\alpha_c) a(\alpha_c, k, \{\mathbf{r}_i\}), \quad (40)$$

где k — номера перестановок \hat{P}_k , принадлежащих классу перестановок, характеризующихся степенью связности их графов α_c , $\xi(\alpha_c) = dn_c/d\alpha_c$ — количество таких классов в расчете на единичный интервал α_c , а

$$a(\alpha_c, k, \{\mathbf{r}_i\}) = \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_k \{\mathbf{r}_i\} \rangle.$$

Ветвь $\rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) \geq 0$ получается подстановкой $\omega(\alpha_c) = \omega^+(\alpha_c) > 0$ и ветвь $\rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) \leq 0$ отвечает $\omega(\alpha_c) = \omega^-(\alpha_c) < 0$. Результирующее распределение представляет сумму двух слагаемых с противоположными знаками,

$$\rho(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) \equiv \rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}),$$

и нормировано на единицу:

$$\iint [\rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})] d\alpha_c d^N r = 1. \quad (41)$$

Равновесное среднее произвольной интенсивной функции $F(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})$ координат $\{\mathbf{r}_i\}$ и распределения по циклам сцепленных траекторий $\{\nu_i\}$ может быть представлено в терминах $\rho(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})$ в виде

$$\langle F \rangle = \iint F(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) [\rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})] d\alpha_c d^N r. \quad (42)$$

В макроскопическом пределе $N \rightarrow \infty$ флуктуации интенсивных величин исчезающе малы, а их функции распределения имеют вид δ -функции Дирака. В частности, для равновесного распределения по степени связности α_c графов имеем

$$\iint [\rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})] d^N r = \delta(\alpha_c - \alpha_c^0), \quad (43)$$

где $\alpha_c^0 = \alpha_c(\{\kappa_i^0\})$, а

$$\kappa_i^0 = \iint \kappa_i(\alpha_c) [\rho^+(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c, \{\mathbf{r}_i\})] d\alpha_c d^N r \quad (44)$$

— значение i -й компоненты среднего и одновременно наиболее вероятного распределения $\{\kappa_i^0\}$ траекторий по циклам. Граф с распределением по циклам

$\{\kappa_i^0\}$ является ведущим. С учетом (43) интегрирование по α_c в (42) выполняется в общем виде, и выражение для равновесного среднего в макроскопическом пределе упрощается:

$$\langle F \rangle = \iint F(\alpha_c^0, \{\mathbf{r}_i\}) [\rho^+(\alpha_c^0, \{\mathbf{r}_i\}) + \rho^-(\alpha_c^0, \{\mathbf{r}_i\})] d^N r. \quad (45)$$

Хотя в (45) не содержится интегрирования по α_c , наличие положительного $\rho^+(\alpha_c^0, \{\mathbf{r}_i\})$ и отрицательного $\rho^-(\alpha_c^0, \{\mathbf{r}_i\})$ слагаемых под знаком интеграла неявно предполагает суммирование по графам со знакопеременными вкладами. Избавиться от этого суммирования можно методом вытесняющего потенциала. Связность ведущего графа является однозначной функцией характерного радиуса r_D вытесняющего потенциала $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$: $\alpha_c^0 = \alpha_c^0(r_D)$. С увеличением r_D малые межчастичные расстояния и сильносвязные графы становятся маловероятными. Поэтому связность α_c^0 ведущего графа монотонно уменьшается вплоть до нуля: $\alpha_c^0(r_D^*) = 0$, где r_D^* — минимальное значение r_D , при котором α_c^0 обращается в нуль. Нулевое значение α_c^0 отвечает единственному графу с полностью расцепленными траекториями ($\kappa_1 = 1, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = 0, \dots, \kappa_N = 0$). Класс перестановок, отвечающий этому графу, состоит из единственной тождественной перестановки с положительным комбинаторным коэффициентом $\omega(\alpha_c)$, и $\rho^-(0, \{\mathbf{r}_i\}) = 0$. Исключение из интеграла (45) посредством отталкивающего потенциала $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$ конфигураций, отвечающих малым межчастичным расстояниям $|\mathbf{r}_n^j - \mathbf{r}_k^j|$, означает изъятие состояний, не удовлетворяющих условиям обменной симметрии (принципу Паули). Исключаются одновременно положительные и компенсирующие их отрицательные вклады. Если область действия вытесняющего потенциала совпадает с областью запрещенных состояний, то разрешенные состояния оказываются незатронутыми и вместо (45) имеем

$$\langle F \rangle = \iint F(0, \{\mathbf{r}_i\}) \rho^+(0, \{\mathbf{r}_i\}; r_D) d^N r, \quad (46)$$

где

$$\rho^+(0, \{\mathbf{r}_i\}; r_D) \propto \langle \{\mathbf{r}_i\} | \times \langle \exp \left\{ -\beta \left[\hat{H} + V_D(\{\mathbf{r}_k^j\}) \right] \right\} | \{\mathbf{r}_i\} \rangle$$

— функция распределения, отвечающая расцепленным траекториям, с вытесняющим потенциалом в

гамильтониане. Выражение (46) не содержит суммирования по графам со знакопеременными вкладами — проблема «отрицательных знаков» отсутствует.

Точность, с которой область действия вытесняющего потенциала совпадает с областью запрещенных состояний, определяет точность, с которой выполняется равенство (46), и точность вычисления равновесных средних. Определение оптимальных численных значений параметров потенциала $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$ осуществлялось на компьютере численными итерациями с использованием самонастраивающегося алгоритма на основе системы обратных связей. Для этого на подготовительном этапе случайных блужданий в пространстве фейнмановских траекторий электронов и различных способов их сцепления суммировались относительные статистические веса конфигураций с положительными и отрицательными комбинаторными коэффициентами $\omega(\{\nu_i\})$. Радиус взаимодействий в функции $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$ непрерывно увеличивался до тех пор, пока вытеснение изображающей точки из области запрещенных состояний не приведет к резкому росту статистического веса положительных конфигураций по сравнению с отрицательными. Далее выполнение шагов по сцеплению и расцеплению траекторий прекращалось, и расчет равновесных средних системы выполнялся с полностью расцепленными траекториями и полученными на подготовительном этапе значениями параметров вытесняющего потенциала $V_D(\{\mathbf{r}_k^j\})$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Эффект конечномерной аппроксимации траекторий Фейнмана

Аппроксимация фейнмановских траекторий ломаными с конечным числом M звеньев означает пренебрежение высшими степенями по β/M членами в высокотемпературном разложении матричных элементов статистического оператора. Погрешность такой аппроксимации определяется соотношением между средней длиной звена траектории $\hbar/\sqrt{k_B T m_e M}$ и характерными размерами пространственной неоднородности системы. При повышении температуры T или увеличении количества M звеньев погрешность конечномерной аппроксимации уменьшается к нулю. При понижении температуры количество звеньев необходимо увеличивать в обратной пропорциональной зависимости от температу-

ры, $M \propto T^{-1}$. Если поле, в котором проводится расчет, имеет сингулярности, то нет смысла учитывать высшие по степеням β/M члены разложений, так как при приближении к точке сингулярной особенности сходимость высокотемпературного ряда ухудшается, а в точке сингулярности ряд для фейнмановского интеграла сходится только условно. Следует отметить, что корректность самого определения фейнмановского континуального интеграла в полях с сингулярностями в общем случае не доказана [47]. Если вклад точки сингулярности в рассчитываемые равновесные средние исчезающе мал, наилучшим способом решения проблемы является исключение точки сингулярности из области интегрирования введением для ядра твердого кора заданного радиуса.

Погрешность, обусловленная конечномерной аппроксимацией фейнмановских траекторий, существует не только в точках сингулярности. Для выявления этих погрешностей необходимо выполнить сравнение с данными, полученными независимыми методами. Прямое сравнение с расчетами традиционными методами представляется возможным только для основного квантового состояния, где такие расчеты принципиально осуществимы. В то же время получить основное квантовое состояние методом интегралов по траекториям можно, понижая температуру. Для корректного описания условий низких температур приходится увеличивать уровень дискретизации траекторий M .

Детальный анализ влияния дискретизации фейнмановских траекторий на радиальное распределение электронной плотности представлен на рис. 1. Энергетический зазор между основным и первым возбужденным уровнями электронной оболочки атома гелия равен $\Delta E \approx 19$ эВ [51], а статистический вес возбужденных квантовых состояний для $T = 2000$ К имеет порядок $\exp(-\Delta E/k_B T) \approx 10^{-54}$. В таких условиях исключены вклады возбужденных квантовых состояний.

Отклонения радиального распределения электронной плотности, вызванные дискретной аппроксимацией фейнмановских траекторий, ведут себя в окрестности кулоновского центра немонотонно. Обнаруживаются следующие закономерности: «втягивание» траекторий в узкую область, прилегающую к точке кулоновской сингулярности $r < 0.1$, и заниженные значения в области $0.1 < r < 0.7$, которые компенсируются завышенными значениями на периферии электронной оболочки $r > 0.7$. Для самой низкой температуры на кривой 1 на расстояниях от

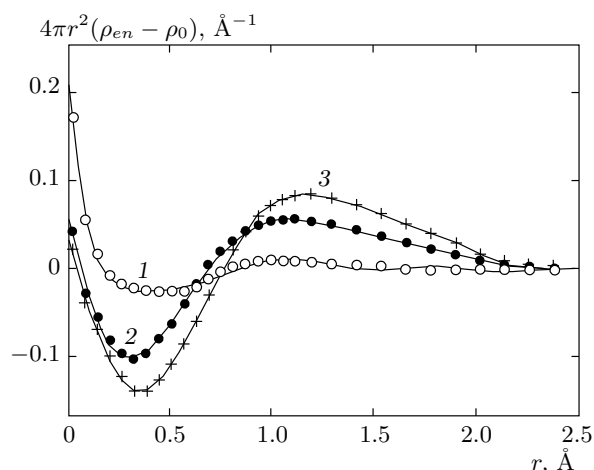


Рис. 1. Отклонения радиальных распределений электронной плотности в атоме гелия в режиме слабого термического возбуждения при температурах 2000 К (1), 3000 К (2) и 4000 К (3) от радиального распределения в основном квантовом состоянии. Расчет методом интегралов по траекториям с $M = 10240$ и $r_0 = 0.01$ Å в концентрической сферической полости фиксированного радиуса $R = 2.5$ Å

ядра, меньших 0.1 Å, наблюдается некоторое превышение рассчитанной электронной плотности над значениями, отвечающими основному квантовому состоянию. С повышением температуры уменьшается средняя длина звена фейнмановской траектории. Результатом является существенное уменьшение отклонений кривых 2 и 3 в точке сингулярности кулоновского потенциала. Однако одновременно растет отклонение этих кривых к низким значениям в области максимума радиального распределения электронной плотности ($r \approx 0.3$ Å), которые компенсируются отклонениями к высоким значениям в области $r > 0.7$ Å. Таким образом, дискретная аппроксимация траекторий приводит к завышению электронной плотности в области около точки сингулярности кулоновского потенциала и ее занижению в области максимума радиального распределения, причем наблюдается довольно сложная зависимость этих отклонений от температуры.

Наличие подвижных границ качественно не меняет этой картины. На рис. 2 представлены радиальные распределения электронной плотности, полученные в условиях флуктуирующих границ для двух значений температуры. Сравнение зависимостей на рис. 2а и 2б показывает, что с понижением температуры наблюдается смещение характерных областей на кривой отклонений в сторону ядра.

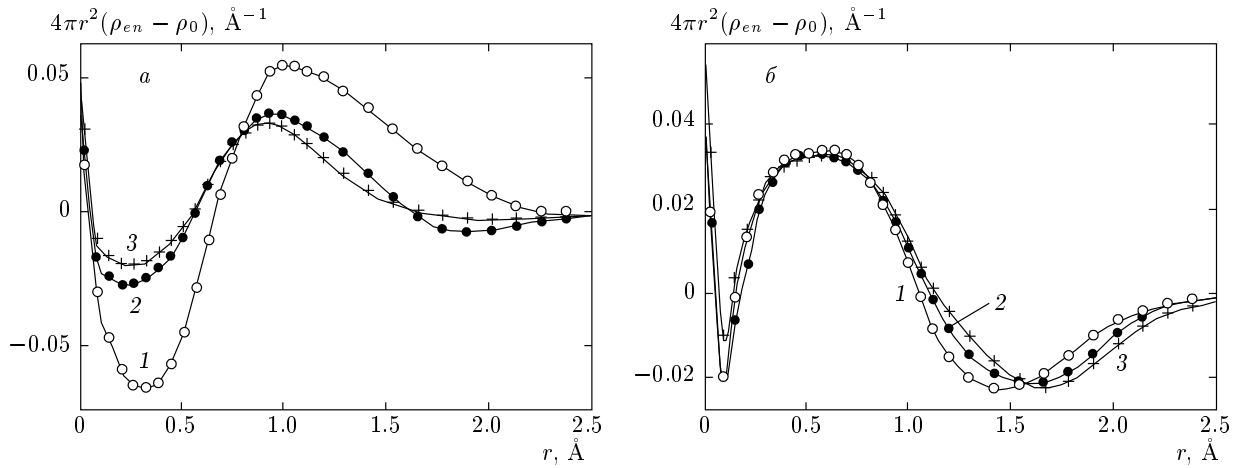


Рис. 2. То же, что на рис. 1, в условиях с подвижными границами. Расчет в статистическом NpT -ансамбле с $M = 40960$ для различных значений температуры и давления: $a - T = 1000$ К, $p = 0.5$ ГПа (1), 1 ГПа (2), 1.5 ГПа (3) и $r_0 = 0.02$ Å; $b - T = 500$ К, $p = 0.2$ ГПа (1), 0.4 ГПа (2), 1 ГПа (3) и $r_0 = 0.04$ Å

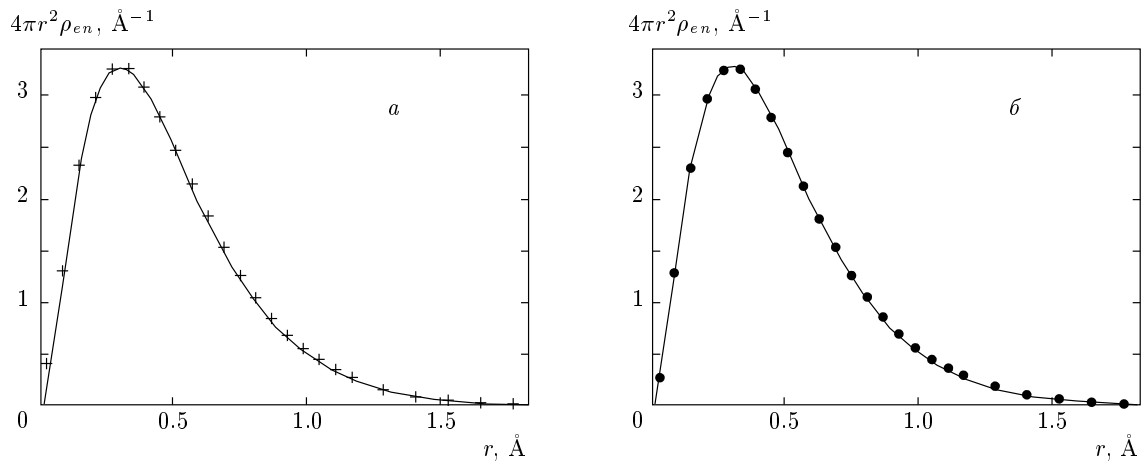


Рис. 3. Радиальное распределение электронной плотности в атоме гелия: сплошная линия — расчет для основного квантового состояния электронной оболочки пространственно-неограниченного атома методом квантовой химии (ЛКАО) [51], точки — расчет методом интегралов по траекториям в статистическом NpT -ансамбле в сферической полости с подвижными границами: $a -$ при $T = 2000$ К и $p = 0.5$ ГПа и степени дискретизации виртуальных траекторий электронов $M = 10240$; $b - T = 1000$ К, $p = 1$ ГПа, $M = 40960$, ограничение на минимальное сближение с точкой сингулярности кулоновского потенциала на ядре, $r_0 = 0.01$ Å

3.2. Основное квантовое состояние электронной оболочки

На рис. 3 представлены результаты расчетов радиального распределения электронной плотности в электронной оболочке атома гелия при температурах $T_a = 2000$ К и $T_b = 1000$ К, отвечающих пренебрежимо малой вероятности термического возбуждения. В первом случае виртуальные траектории электронов аппроксимированы двумя замкнутыми ломаными, состоящими из $M = 10240$,

а во втором — из $M = 40950$ звеньев каждая. Ядро атома гелия фиксировалось в центре сферической полости, объем которой флуктуировал в соответствии с равновесной функцией распределения изотермо-изобарического статистического ансамбля. Сравнение распределений с данными расчетов методами квантовой химии в приближении линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) для основного квантового состояния свидетельствует о хорошем согласии обоих методов. В то же время

энергия оказалась характеристикой, довольно чувствительной к выбору уровня дискретизации траекторий. С понижением температуры степень дискретизации должна увеличиваться примерно обратно пропорционально температуре. Заниженные значения M влекут заниженные значения энергии, причина которых — в нефизической кулоновской сингулярности во взаимодействии допредельной (ломающей) траектории с ядром. По этой причине результаты расчетов при температуре T_b (рис. 3б) являются более точными, чем при температуре T_a (рис. 3а). В случае T_b расчет выполнен при $M = 40960$, и для энергии электронной оболочки получены значения -78.72 эВ с помощью основного эстиматора (12) кинетической энергии и -78.96 эВ на основе вириального эстиматора (20). При этом экспериментальное значение для основного состояния атома гелия составляет -78.98 эВ. Расчеты с уровнем дискретизации, в четыре раза более низким ($M = 10240$), и при температуре T_a , только в два раза более высокой, повлекло занижение энергии системы примерно на 2%: получены значения -81.12 эВ с основным эстиматором и -81.48 эВ с вириальным.

Состояния сильного сжатия электронной оболочки представлены на рис. 4. Кардинальные изменения в распределении электронной плотности наблюдаются в полости радиусом $R < 1.5 \text{ \AA}$. Максимум распределения при сжатии растет, но почти не смещается (рис. 4б). Кинетическая энергия электронов увеличивается от 75.71 эВ для $R = 3.0 \text{ \AA}$ до 111.83 эВ для $R = 1.0 \text{ \AA}$. Полная энергия растет соответственно от -78.32 эВ до -70.14 эВ; кинетическая энергия при сжатии меняется примерно в пять раз быстрее, чем полная.

На рис. 5 представлена зависимость давления, которое электронная оболочка оказывает на стенки сферической полости, от объема полости. Давление вычислялось по формуле

$$p = \frac{2}{3V} \left(\langle K \rangle - \langle \tilde{K}_{vir} \rangle \right),$$

которая является частным случаем формулы (17) в отсутствие свободных классических частиц. Наклон прямой в двойном логарифмическом масштабе, равный -2.62 , отвечает степенной зависимости $p [\text{Па}] \approx 2.39 \cdot 10^{13} V^{-2.62} (V [\text{Å}^3])$. Отношение изотермической сжимаемости оболочки к сжимаемости идеального газа классических частиц ($\kappa_0 = 1/p$) при том же давлении равно

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = -\frac{p}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = -\left(\frac{\partial \lg V}{\partial \lg p} \right)_T = \frac{1}{2.62} \approx 0.38$$

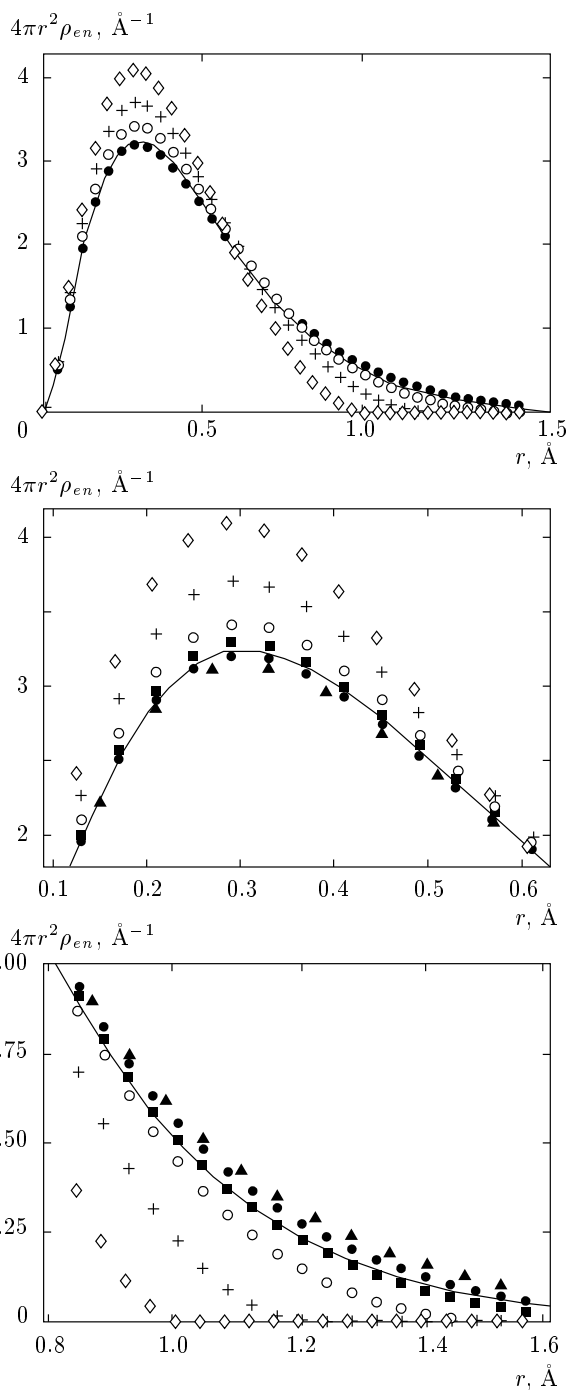


Рис. 4. Эволюция радиального распределения электронов при сжатии атома гелия в концентрической сферической полости радиуса $R = 3.0 \text{ \AA}$ (\blacktriangle), 2.0 \AA (\bullet), 1.8 \AA (\blacksquare), 1.5 \AA (\circ), 1.2 \AA ($+$), 1.0 \AA (\diamond). Точки — расчет методом интегралов по траекториям в каноническом (NVT) статистическом ансамбле при температуре 1000 K с $M = 40960$, $r_0 = 0.01 \text{ \AA}$. Сплошная линия — основное квантовое состояние пространственно-неограниченного атома, полученное методом ЛКАО [51]. На двух нижних рисунках приведены в увеличенном масштабе части кривой в районе максимума и при больших расстояниях

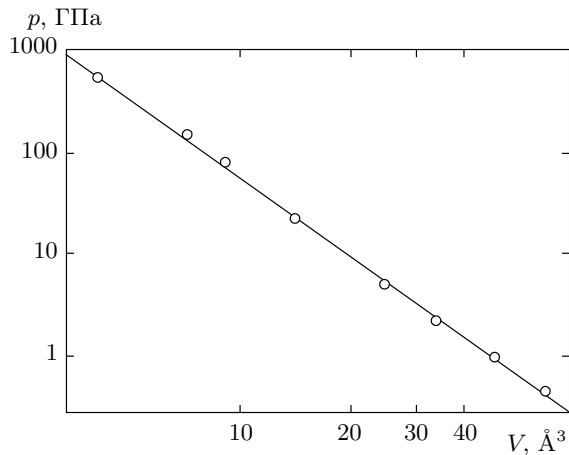


Рис. 5. Зависимость давления, которое оказывает электронная оболочка атома гелия на стенки сферической полости, от объема полости. Расчет в статистическом NVT -ансамбле при $T = 1000$ К с $M = 40960$ и $r_0 = 0.01$ Å

и, как следует из зависимости на рис. 5, в области $1 \text{ ГПа} < p < 10^3 \text{ ГПа}$ относительно слабо зависит от давления. Сжимаемость электронной оболочки меняется здесь, как и в идеальном газе, почти обратно пропорционально давлению, $\kappa = 0.38\kappa_0 = 0.38/p$. Согласно расчетам в широком диапазоне давлений [42], отношение κ/κ_0 для атома водорода при его сжатии растет и достигает при $p = 10^3$ ГПа величины 0.74. Таким образом, сжимаемость электронной оболочки атома гелия при этих давлениях примерно в два раза меньше, чем атома водорода. При варьировании давления в широких пределах сжимаемость атома водорода по сравнению с идеальным газом того же давления уменьшается при сжатии атома водорода медленнее. Вероятно, причина этого явления кроется в кулоновских силах притяжения со стороны ядра, эффект от действия которых имеет тот же знак, что и внешнее давление, нарастая при сжатии электронной оболочки. В многоэлектронных атомах, в частности, в атоме гелия, действующие в противоположном направлении силы отталкивания между электронами частично уравновешивают этот эффект. Компенсация сил притяжения со стороны ядра происходит также за счет обменных эффектов, которые особенно существенны в системах, содержащих более двух электронов. Поэтому следует ожидать, что в многоэлектронных системах зависимость сжимаемости электронной оболочки от давления гораздо более слабая, чем в атоме водорода, и уравнение состояния ближе к уравнению состоя-

ния электронного газа. Этим, вероятно, объясняется улучшение точности результатов, получаемых в приближении теории функционала плотности, с увеличением количества электронов.

3.3. Термически возбужденные квантовые состояния

Расчеты радиального распределения электронов около ядер выполнены в ячейковой модели плазмы с уровнем дискретизации фейнмановских траекторий $M = 320$. Два электрона и ядро, несущее электрический заряд $+2e$, помещались в сферическую ячейку с подвижными границами. Объем ячейки флуктуировал в соответствии с функцией распределения изотермо-изобарического статистического ансамбля (22). Ядро фиксировалось в центре ячейки. Давление пересчитывалось к условиям подвижного ядра по формуле (25). Усреднение проводилось по $5 \cdot 10^9$ конфигурациям виртуальных траекторий, которым предшествовали 10^9 марковских шагов термализации. Применялась процедура последовательного сжатия системы. Результаты представлены на рис. 6.

В радиальном распределении пары электронов около ядра выделяются области малых и больших расстояний с соответствующими им максимумами на функции распределения. Первый максимум в районе $r \approx 0.3\text{--}0.4 \text{ \AA}$ формируется главным образом за счет основного квантового состояния электронной оболочки атома гелия и слабо смещается при варьировании давления. Второй максимум формируется за счет возбужденных квантовых состояний. Его положение сильно зависит от давления, а высота — от температуры. С увеличением давления и температуры второй максимум растет. Очевидно, что при понижении температуры и давления статистические веса возбужденных квантовых состояний перераспределяются в пользу состояний с высокими значениями квантовых чисел n . Это происходит вследствие уменьшения больцмановских множителей $\exp(-E_n/k_B T)$ с одновременным смещением вниз энергетических уровней E_n , отвечающих большим n . Наоборот, сжатие системы приводит к вытеснению вверх прежде всего энергетических уровней с большими номерами n и перераспределению статистических весов в пользу состояний в нижней части энергетического спектра. Пространственная локализация таких состояний отвечает меньшим расстояниям до ядра. Одновременное повышение температуры приводит к росту статистических весов таких состояний относительно основного квантового состоя-

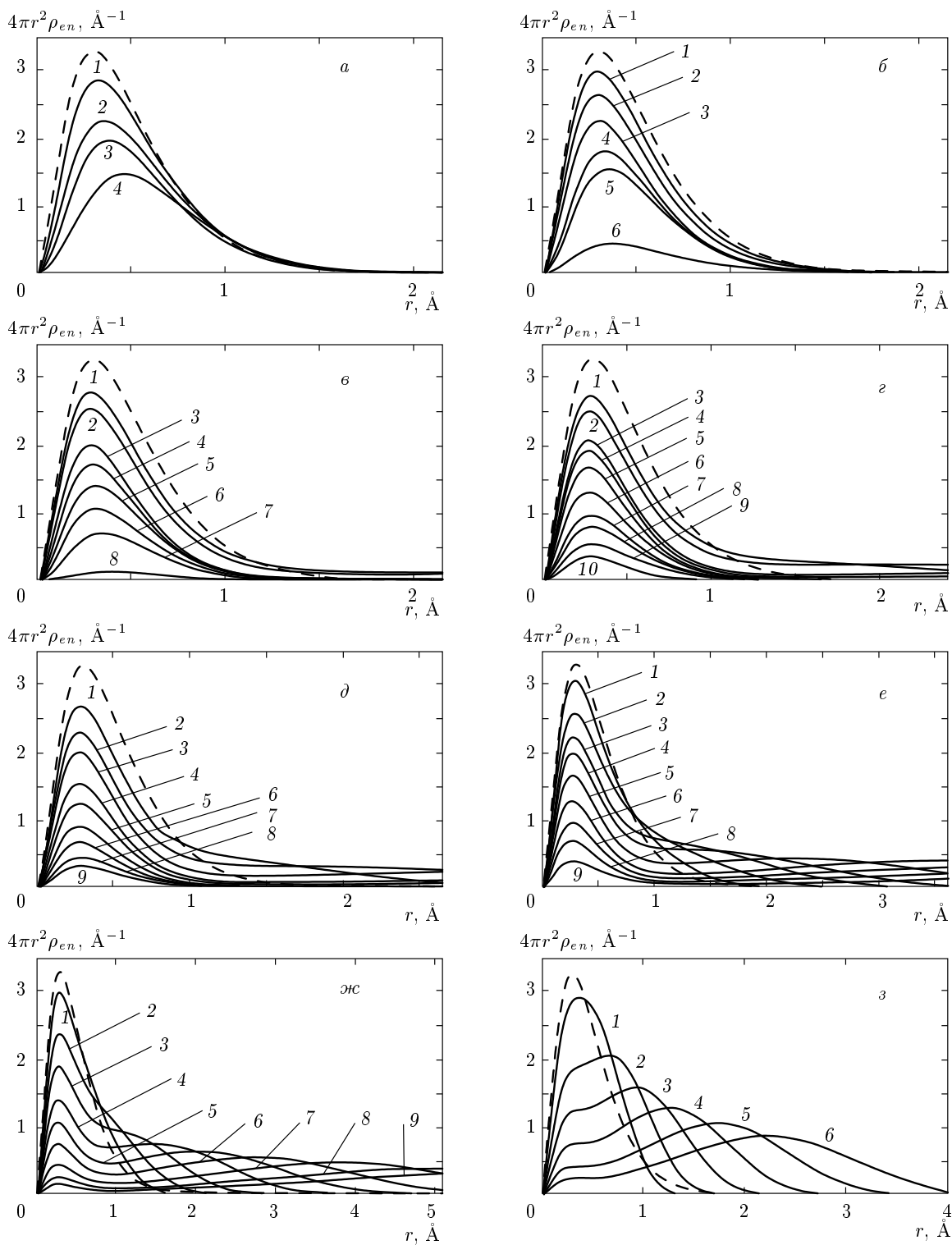


Рис. 6. Плотность вероятности обнаружить электрон на расстоянии r от ядра при различных значениях температуры и давления, приведенных в таблице. Расчет методом интегралов по траекториям и моделированием взаимодействий с плазмой методом статистического ансамбля с флуктуирующими границами. Пунктир — основное квантовое состояние пространственно-неограниченного атома гелия, рассчитанное методом ЛКАО [51]

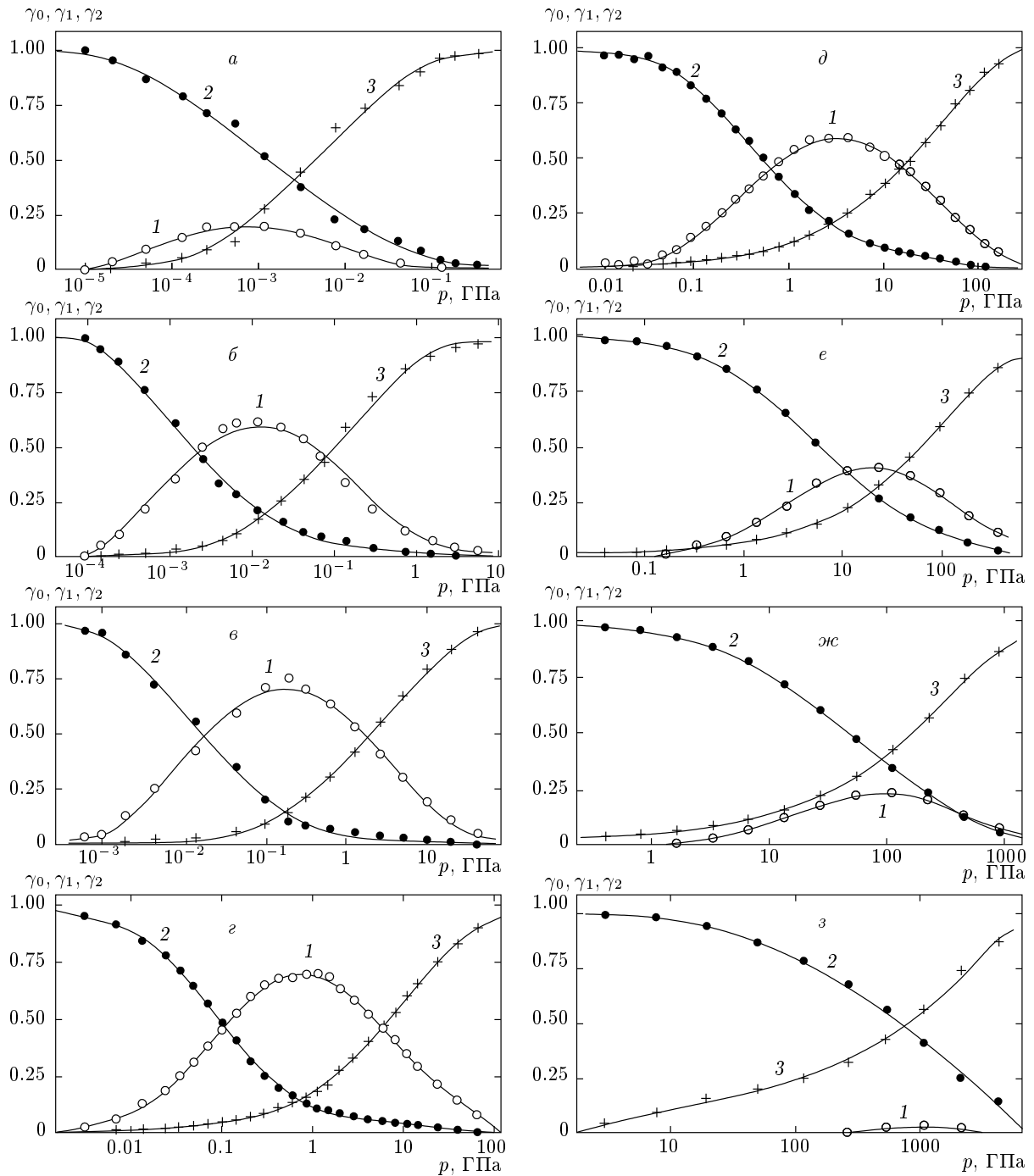


Рис. 7. Относительные содержания однократно γ_1 (кривые 1) и двукратно γ_2 (2) ионизированных ионов, а также неионизированных γ_0 (3) атомов гелия в плазме различной температуры: *a* – 30000 К; *б* – 40000 К; *в* – 60000 К; *г* – 80000 К; *д* – 100000 К; *е* – 140000 К; *жс* – 200000 К; *з* – 400000 К

ния. Следствием этого является рост второго максимума на радиальном распределении электронов на рис. 6*жс,з*.

С повышением температуры и ростом давления оба максимума на радиальном распределении электронов сливаются, и идентификация основного кван-

тового состояния электронной оболочки атома на фоне возбужденных состояний становится невозможной. Это происходит при температурах выше $T_I \approx 10^6$ К и соответствует полному разрушению электронной оболочки атома. Температурой T_I полного разрушения электронной оболочки в плазме следует считать такую температуру, при которой минимум, разделяющий оба максимума на радиальном распределении электронов (рис. 6), полностью исчезает. Постепенное нивелирование этого минимума можно проследить на зависимостях, представленных на рис. 6*д-з*. При температурах выше T_I относительный статистический вес связанных квантовых состояний электронов в поле ядра исчезающе мал и неионизированные состояния принципиально невозможны. Поэтому понятие частично ионизированной плазмы имеет смысл только при $T < T_I$.

3.4. Степень ионизации

Численные результаты для зависимости степени ионизации от температуры и давления при $T < T_I$ получены в ячейковой модели плазмы с подвижными границами ячейки. С повышением температуры степень пространственной делокализации меняется непрерывно от полной локализации электрона в основном состоянии электронной оболочки атома до предельного случая свободного движения, отвечающего полной пространственной делокализации. Кинетическая энергия электронов при варьировании температуры меняется от кинетической энергии K_0 в основном квантовом состоянии атома до классического предела $3Nk_B T/2$, отвечающего несвязанным состояниям. В пределе бесконечно разреженной плазмы потенциальная энергия электронов меняется от потенциальной энергии U_0 в основном квантовом состоянии атома до нуля, отвечающего энергии идеального газа.

В достаточно разреженной плазме температура ионизации становится ниже энергетического зазора $k_B T < \Delta E$ между основным и первым возбужденным квантовым состояниями электронной оболочки, а относительный статистический вес возбужденных квантовых состояний, пропорциональный $\exp(-\Delta E/k_B T)$, — исчезающе малым. В термодинамике такой плазмы существенны только основные квантовые состояния, отвечающие неионизированному атому и его многократно ионизированным ионам. Поскольку расстояние между основным и первым возбужденным энергетическими уровнями в атомах измеряется несколькими электронвольтами, температура, ниже которой роль возбужденных

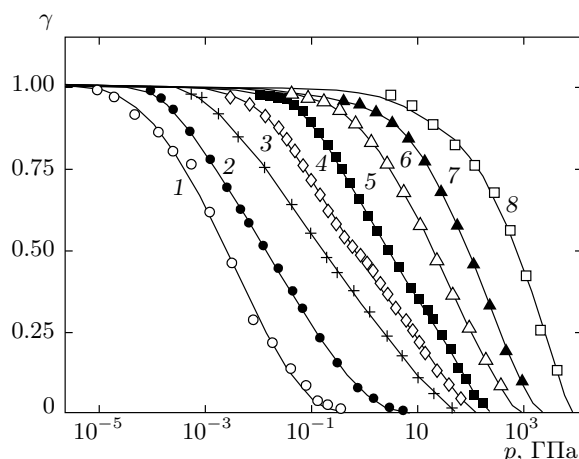


Рис. 8. Зависимости степени ионизации гелиевой плазмы от давления при различных температурах: 1 — 30000 К; 2 — 40000 К; 3 — 60000 К; 4 — 80000 К; 5 — 100000 К; 6 — 140000 К; 7 — 200000 К; 8 — 400000 К

квантовых состояний электронных оболочек в термодинамическом поведении плазмы несущественна, измеряется десятками тысяч градусов Кельвина.

При увеличении плотности плазмы температура ионизации растет, однако за счет увеличения энергетического зазора ΔE , которое является следствием вытеснения энергетических уровней возбужденных квантовых состояний к высоким значениям, статистический вес возбужденных квантовых состояний может оставаться низким и здесь. По этой причине следует ожидать расширения области, где возбужденные квантовые состояния электронных оболочек атомов и ионов имеют относительно малые статистические веса, в сторону высоких температур до сотен тысяч градусов. Компьютерное моделирование подтверждает эти ожидания. Из данных, представленных на рис. 6, видно, что с повышением температуры и давления в области средней степени ионизации не наблюдается заметного смещения первого максимума распределения электронной плотности к большим расстояниям, что свидетельствовало бы о существенных вкладах возбужденных квантовых состояний. Максимум характерного колоколообразного распределения, несмотря на значительные вариации его высоты, остается на расстоянии около 0.3 \AA от ядра, отвечающем основному квантовому состоянию электронной оболочки. Эта особенность в поведении плазмы низкой и средней плотности позволяет ограничиться в описании ее термодинамического поведения только основными квантовыми состоя-

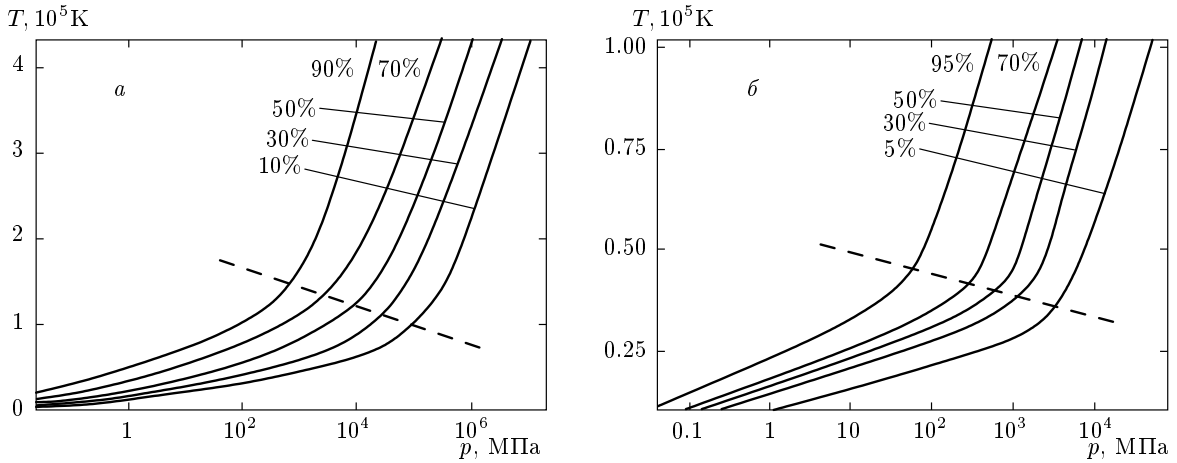


Рис. 9. Изолинии, отвечающие различным степеням ионизации на p - T -диаграммах гелиевой (а, настоящая работа) и водородной (б, [42]) плазмы. Степень ионизации γ указана в процентах

ниями электронных оболочек и состояниями полной пространственной делокализации. Применительно к гелиевой плазме, ионизационно-рекомбинационное равновесие сводится к конкуренции между основным квантовым состоянием электронной оболочки атома гелия с кинетической энергией электронов K_0 и потенциальной энергией U_0 , основным квантовым состоянием электронной оболочки однократно ионизованного иона гелия с кинетической энергией электрона в этом состоянии K_0^+ и его потенциальной энергией U_0^+ и состоянием полной пространственной делокализации электронов, которые в пределе бесконечной разреженной плазмы имеют (в расчете на один электрон) равновесную среднюю кинетическую энергию $3k_B T/2$.

Из распределения энергии электронов между кинетической и потенциальной составляющими можно найти степень ионизации плазмы. Для этого напишем уравнения баланса равновесной кинетической K и потенциальной U энергий электронов в плазме. В расчете на один атом гелия и в пренебрежении кулоновским взаимодействием со свободными электронами, образовавшимися в результате ионизации, имеем

$$(1 - \gamma_1 - \gamma_2)U_0 + \gamma_1 U_0^+ = U, \quad (47)$$

$$(1 - \gamma_1 - \gamma_2)U_0^{ee} = U^{ee}, \quad (48)$$

где γ_1 и γ_2 — вероятности соответственно однократной и двукратной ионизации атома гелия, U^{ee} — равновесная средняя энергия взаимодействия электронов в электронной оболочке, U_0^{ee} — то же для ее основного квантового состояния. Первые слагаемые в левых частях уравнений (47), (48) отвечают

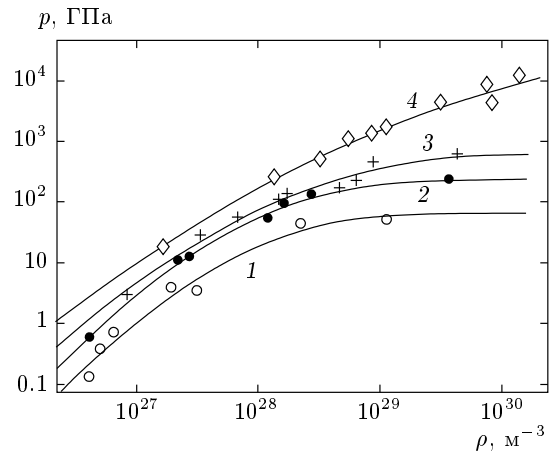


Рис. 10. Изотермы уравнения состояния гелиевой плазмы, рассчитанные методом интегралов по траекториям в системе с периодическими граничными условиями в статистическом ансамбле с подвижными границами: 1 — 100000 К; 2 — 140000 К; 3 — 200000 К; 4 — 400000 К

неионизованному состоянию атома, а второе слагаемое в правой части уравнения (47) отвечает образованию пары однозарядного положительного иона гелия и свободного электрона. Аналогичное ему слагаемое отсутствует во втором уравнении, так как после однократной ионизации взаимодействие между электронной оболочкой иона и свободным электроном считается пренебрежимо малым. Решение уравнений (47), (48) имеет вид

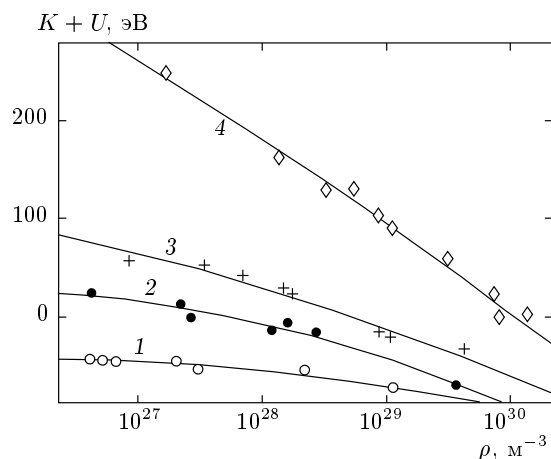


Рис. 11. Зависимости полной внутренней энергии гелиевой плазмы (суммы кинетической энергии ядер, кинетической энергии электронов и энергии взаимодействия всех частиц) в расчете на одно ядро гелия как функции плотности плазмы вдоль изотерм, отвечающих различным значениям температуры: 1 — 100000 К; 2 — 140000 К; 3 — 200000 К; 4 — 400000 К

$$\gamma_1 = \frac{U}{8E_0^H} - \frac{U^{ee}}{U_0^{ee}} \frac{E_0}{4E_0^H}, \tag{49}$$

$$\gamma_2 = 1 - \frac{U}{8E_0^H} - \frac{U^{ee}}{U_0^{ee}} \left(1 - \frac{E_0}{4E_0^H} \right), \tag{50}$$

$$\gamma_0 = 1 - \gamma_1 - \gamma_2, \tag{51}$$

где γ_0 — относительное содержание неионизированных атомов, а для водородоподобного однозарядного иона гелия использовано выражение кулоновской части энергии основного квантового состояния через энергию основного квантового состояния атома водорода, $U_0^+ = 8E_0^H$ с $E_0^H = -13.606$ эВ. Энергия взаимодействия электронов в основном квантовом состоянии атома гелия, $U_0^{ee} = 25.6$ эВ, рассчитана численно методом интегралов по траекториям в условиях изотермо-изобарического статистического ансамбля с фиксированным ядром, при $T = 1000$ К и давлении на оболочку $p = 1$ ГПа. Выход на основное квантовое состояние контролировался сопоставлением радиальных распределений электронной плотности и энергии с расчетами методом линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) [51]. При этом для полной энергии в этих условиях методом интегралов по траекториям получено значение -78.8 эВ, которое отличается от экспериментального значения энергии основного квантового состояния атома гелия [51]

$$E_0 = K_0 + U_0 = K_0 + U_0^{ee} + U_0^{ei} = -78.98 \text{ эВ}$$

не более, чем на 0.2%. Кроме того, использовано свойство кинетической энергии K_0 , справедливое для пространственно-неограниченных систем квантовых частиц, взаимодействующих посредством кулоновского поля, $K_0 = -U_0/2$ [41, 42], и вытекающее из него соотношение $U_0 = 2E_0$.

Критерий, выраженный уравнениями (47) и (48), предполагает проецирование всех квантовых состояний электронов плазмы на волновые функции плоских волн, отвечающих свободному движению (состояние ионизации) и волновые функции основных состояний электронных оболочек атома гелия и его однозарядного иона. В плазме средней плотности могут реализоваться также промежуточные состояния, классификация которых неоднозначна. В этих условиях критерий (47), (48) устанавливает условия границы ионизированных состояний.

Согласно (49)–(51), оценка степени ионизации в плазме сводится к вычислениям равновесной потенциальной энергии U и энергии взаимодействия электронов U^{ee} как функций температуры и давления в плазме. Расчеты осуществлены численно методом интегралов по траекториям. Результаты представлены на рис. 7, 8.

Содержание однозарядных ионов немонотонно зависит от температуры и давления (плотности) плазмы. При варьировании давления количество однозарядных ионов проходит через максимум, положение и высота которого зависят от температуры. Как видно из зависимостей, представленных на рис. 7, нарастание концентрации однозарядных ионов при уменьшении плотности плазмы сменяется ее убыванием вследствие превращения части однозарядных ионов в двухзарядные. С увеличением температуры максимальное содержание однозарядных ионов сначала растет (рис. 7а–в), достигая примерно 75%, а затем уменьшается (рис. 7г–з). Однозарядные ионы образуются в существенных количествах только в области средних температур ($50000 \text{ К} < T < 150000 \text{ К}$). В области низких и высоких температур ионизация идет по пути образования двухзарядных ионов. Точка максимального содержания однозарядных ионов отвечает температуре примерно 80000 К, давлению 0.8 ГПа и плотности $3 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$. При этом степень ионизации плазмы $\gamma = (\gamma_1 + 2\gamma_2)/2$, равная относительному количеству электронов, перешедших в несвязанные состояния, меняется с варьированием плотности и температуры монотонно, увеличиваясь с повышением температуры и уменьшением давления. На рис. 8 представлены изотермы γ , охватывающие состояния от неионизированного газа ($\gamma = 0$) до полностью ионизирован-

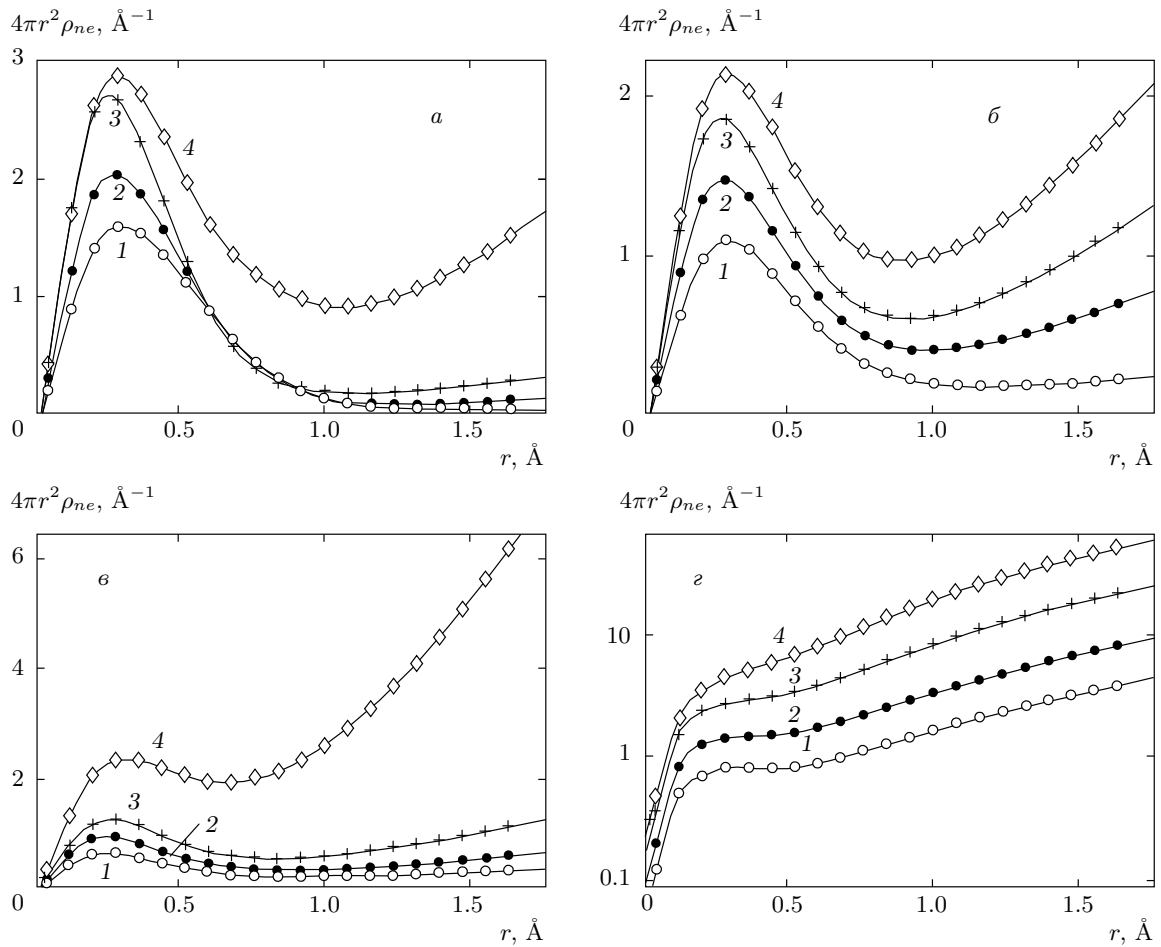


Рис. 12. Радиальные распределения электронной плотности вокруг ядер гелия в плазме различной температуры T и плотности ρ : *а* — $T = 100000$ К, $\rho = 4.02 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ (1), $6.58 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ (2), $3.03 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (3), $2.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (4); *б* — $T = 140000$ К, $\rho = 2.17 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2), $1.63 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (3), $2.75 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (4); *в* — $T = 200000$ К, $\rho = 3.36 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $6.94 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (2), $1.47 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (3), $8.83 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (4); *г* — $T = 400000$ К, $\rho = 5.45 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.14 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (2), $3.13 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (3), $7.52 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (4). Расчет методом интегралов по траекториям в системе с периодическими граничными условиями

ной плазмы ($\gamma = 1$). Каждая изотерма рассчитана последовательным уменьшением давления: термализация системы начиналась с последней конфигурации, полученной при расчете предыдущей точки.

В первом приближении степень ионизации зависит от давления логарифмически. В исследованном диапазоне температур полная ионизация плазмы происходит при падении давления примерно на четыре порядка. Рассчитанные изолинии постоянства степени ионизации в гелиевой плазме представлены на рис. 9а, а для водородной плазмы — на рис. 9б. Как и в случае водородной плазмы, в гелиевой плазме различаются две ветви изолиний — в области низких и в области высоких давлений и температур (на рис. 9 разделены штрихами). Пер-

вая ветвь, в области средней плотности, отвечает сильной, а вторая, в области высокой плотности — слабой температурной зависимости. Формы характерных ветвей для водородной и гелиевой плазмы качественно схожи, однако в случае гелиевой плазмы они сдвинуты примерно на полтора порядка в сторону больших давлений и примерно в четыре раза в сторону высоких температур.

3.5. Уравнение состояния

Расчет уравнения состояния плазмы выполнен в системе с периодическими граничными условиями в статистическом ансамбле с подвижными границами (NpT). Ячейка периодичности кубической

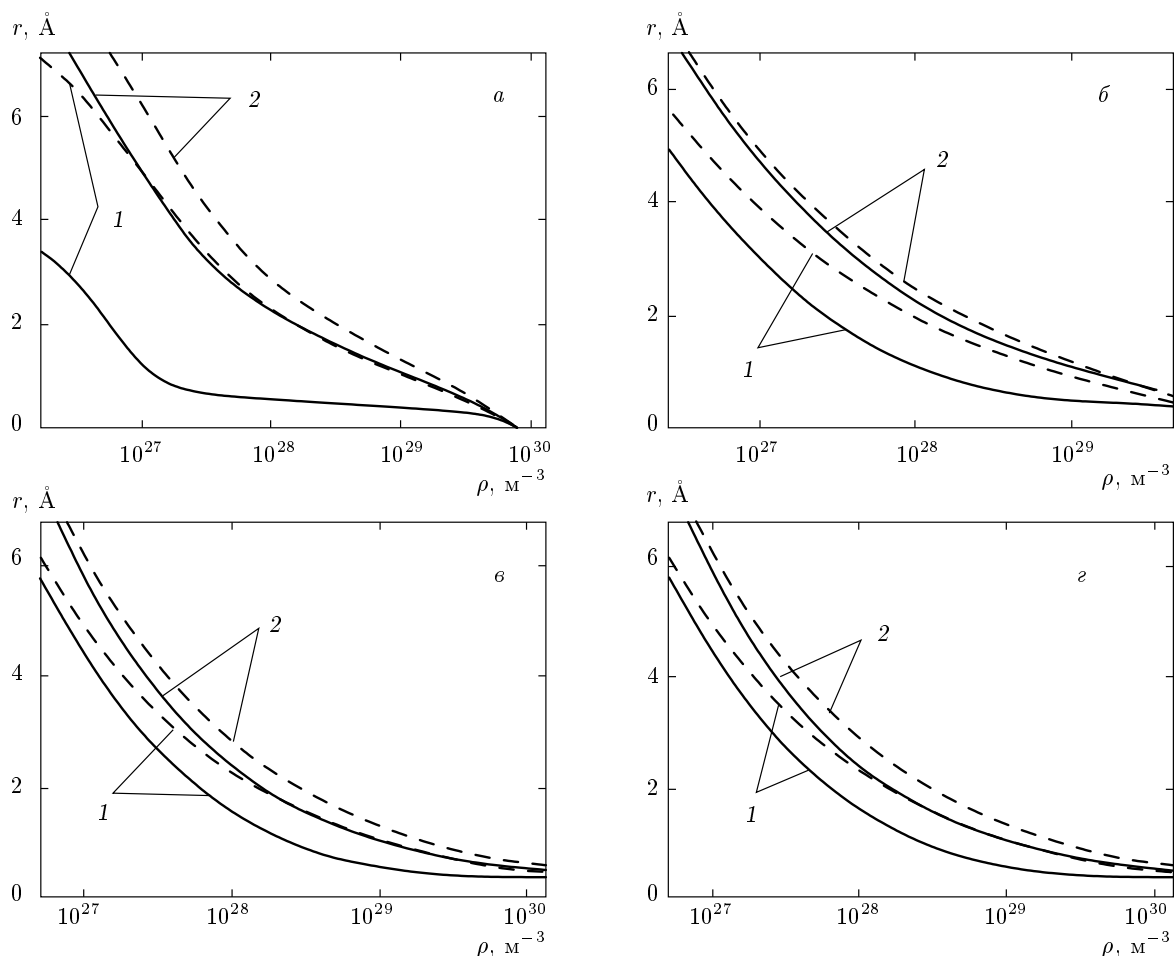


Рис. 13. Зависимости радиуса сферы с центром на ядре гелия, содержащей в среднем один электрон (кривые 1) и два электрона (2), от плотности плазмы при температурах 100000 К (а), 140000 К (б), 200000 К (в), 400000 К (г). Сплошные линии — расчет методом интегралов по траекториям в системе с периодическими граничными условиями, штриховые — те же зависимости в гипотетической системе с идеально однородным пространственным распределением электронов при той же плотности

формы содержала 48 ядер атомов гелия, несущих электрический заряд по $+2e$, и 96 электронов, несущих заряд по $-e$ и представленных фейнмановскими траекториями, состоящими из $M = 320$ звеньев. Объем ячейки периодичности флуктуировал в соответствии с равновесной функцией распределения изотермо-изобарического (NpT) статистического ансамбля. Усреднение методом Монте-Карло проводилось в существенной выборке объемом $3 \cdot 10^9$ конфигураций виртуальных траекторий. Расчету равновесных средних предшествовал этап термализации в течение 10^9 марковских шагов с применением алгоритма последовательного удвоения количества звеньев в траекториях. Расчет одного термодинамического состояния занимал около 700 ч компьютерного времени.

Изотермы уравнения состояния в осях плотность–давление представлены на рис. 10. При уменьшении температуры ниже примерно 300000 К кривая давления в двойном логарифмическом масштабе отклоняется от линейной зависимости, соответствующей идеальному газу, к низким значениям. При температуре около 100000 К и плотности выше порядка 10^{29} м^{-3} изотермы проходят почти параллельно оси абсцисс, что соответствует резкому увеличению изотермической сжимаемости $\rho^{-1}(\partial\rho/\partial p)_T$. Сжимаемость растет за счет эффекта втягивания электронов в поле ядер с образованием связанных состояний ядро–электрон, сопровождающимся уменьшением объема плазмы. Та же причина приводит в этой области к резкому увеличению термического коэффициента расширения $-\rho^{-1}(\partial\rho/\partial T)_p$,

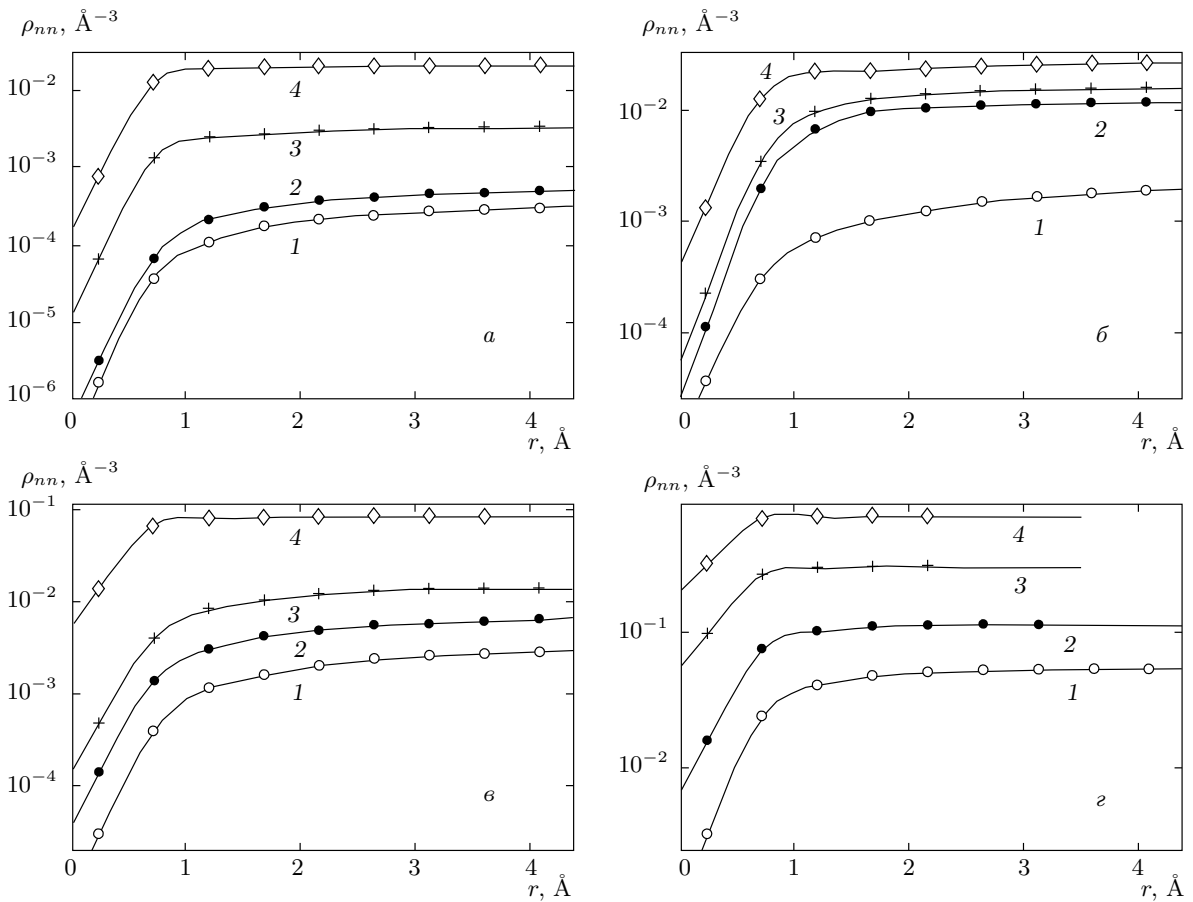


Рис. 14. Пространственные корреляционные функции ядро–ядро в гелиевой плазме. Нумерация кривых отвечает тем же термодинамическим условиям, как и на рис. 12

которое очевидно из формы кривых на рис. 10. Большие значения обоих термических коэффициентов отвечают области частичной ионизации. В основе их формирования лежит интенсивное разрушение электронных оболочек атомов. Поэтому квантовая природа электронной компоненты здесь весьма существенна.

Изотермическое сжатие плазмы в области средних плотностей сопровождается понижением ее внутренней энергии (рис. 11). Уменьшение энергии обусловлено усилением пространственных межчастичных корреляций. Квантовая природа электронной компоненты приводит к заметному ослаблению этой зависимости из-за повышения кинетической энергии электронов при сжатии. Например, при температуре 100000 К сжатие плазмы до плотности 10^{29} м^{-3} приводит примерно к трехкратному превышению кинетической энергии электронов над классическим пределом $3k_B T/2$, что в расчете на одно ядро соответствует примерно 60 эВ, т. е. того же порядка, что

и внутренняя энергия системы в целом в этой области. Этот квантовый «разогрев» электронной компоненты частично компенсирует понижение кулоновской энергии взаимодействующих зарядов в плазме и ослабляет зависимость внутренней энергии от плотности по сравнению с системами классических частиц. Тот же знак имеет и эффект квантовомеханической пространственной делокализации электронов в их взаимодействии с ядрами. С повышением температуры оба эффекта ослабевают и наклон кривых внутренней энергии на рис. 11 растет, приближаясь к классическому пределу.

3.6. Пространственные корреляции

Бинарные корреляционные функции ядро–электрон $\rho_{ne}(r)$, ядро–ядро $\rho_{nn}(r)$ и электрон–электрон $\rho_{ee}(r)$ нормированы следующим образом:

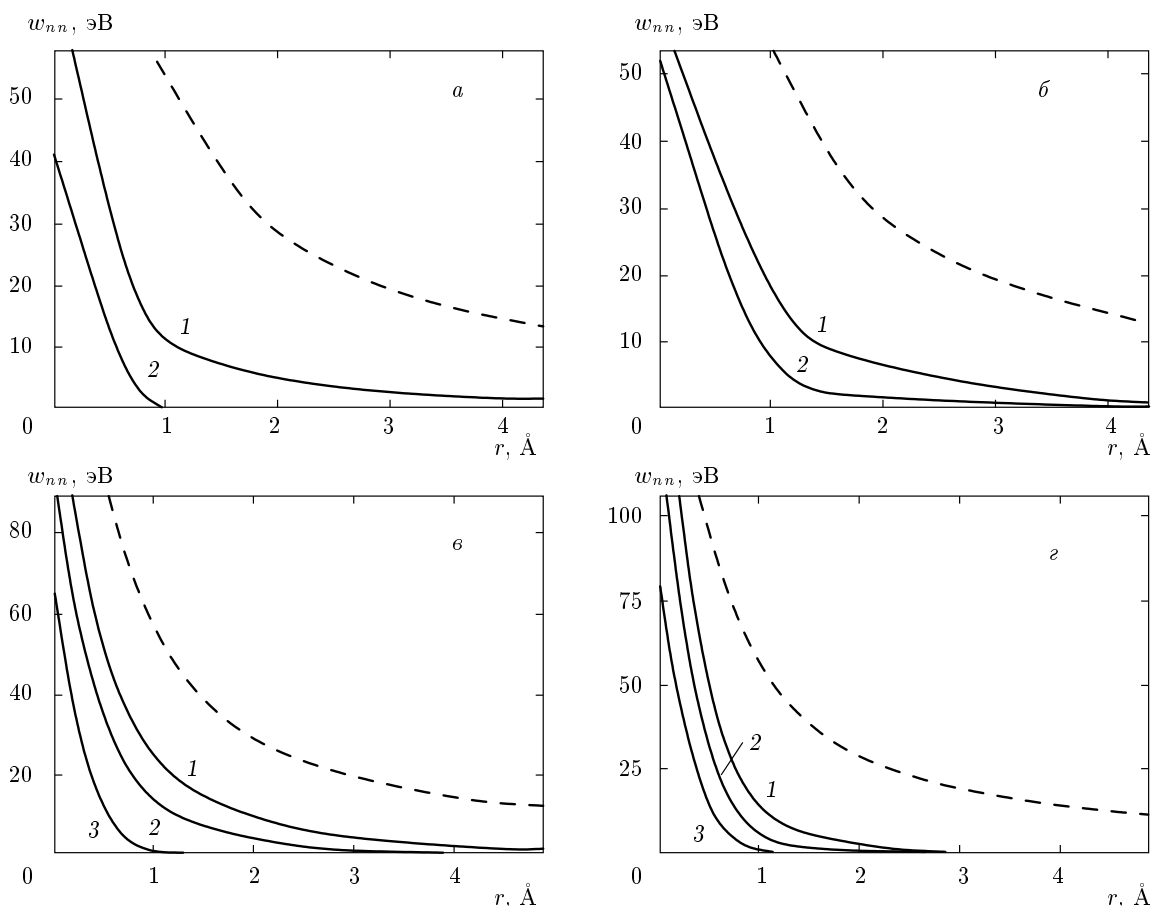


Рис. 15. Потенциал средней силы взаимодействия ядро–ядро в гелиевой плазме как функция межъядерного расстояния при различных значениях температуры и плотности: а – $T = 100000$ К, $\rho = 4.02 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ (1), $2.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2); б – $T = 140000$ К, $\rho = 2.17 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2); в – $T = 200000$ К, $\rho = 3.36 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.47 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2), $8.83 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (3); г – $T = 400000$ К, $\rho = 5.45 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.14 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (2), $3.13 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (3). Штрихи – кулоновская энергия взаимодействия двух точечных зарядов величины $+2e$

$$\int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_{ne}(r) dr = N, \quad \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_{nn}(r) dr = N_n - 1,$$

$$\int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_{ee}(r) dr = N - 1,$$

где N — количество электронов, а $N_n = N/2$ — количество ядер в системе.

При нагревании вплоть до 300000 К в форме радиальных распределений электронной плотности около ядер сохраняются черты, характерные для основного квантового состояния электронной оболочки атома гелия с максимумом на расстоянии около 0.3 Å от ядра (рис. 12). Слабая зависимость положения этого максимума от температуры и плотности плазмы свидетельствует о том,

что главный вклад в неионизированные состояния в плазме дает основное квантовое состояние электронной оболочки атома. В переходной области от неионизированных к ионизированным состояниям энергетический зазор между основным и первым возбужденным квантовыми состояниями остается больше тепловой энергии $k_B T$: в низкотемпературной части ($T < 150000$ К) за счет относительно низких значений $k_B T$, а в высокотемпературной ($150000 \text{ К} < T < 300000$ К) за счет большей плотности плазмы и, как следствие, вытеснения возбужденных энергетических уровней к большим значениям и увеличения энергетического зазора. При температурах выше 300000 К плотность плазмы, отвечающая переходу от неионизированных к ионизированным состояниям, достигает значений, при которых основное квантовое состояние отдельного атома теряет

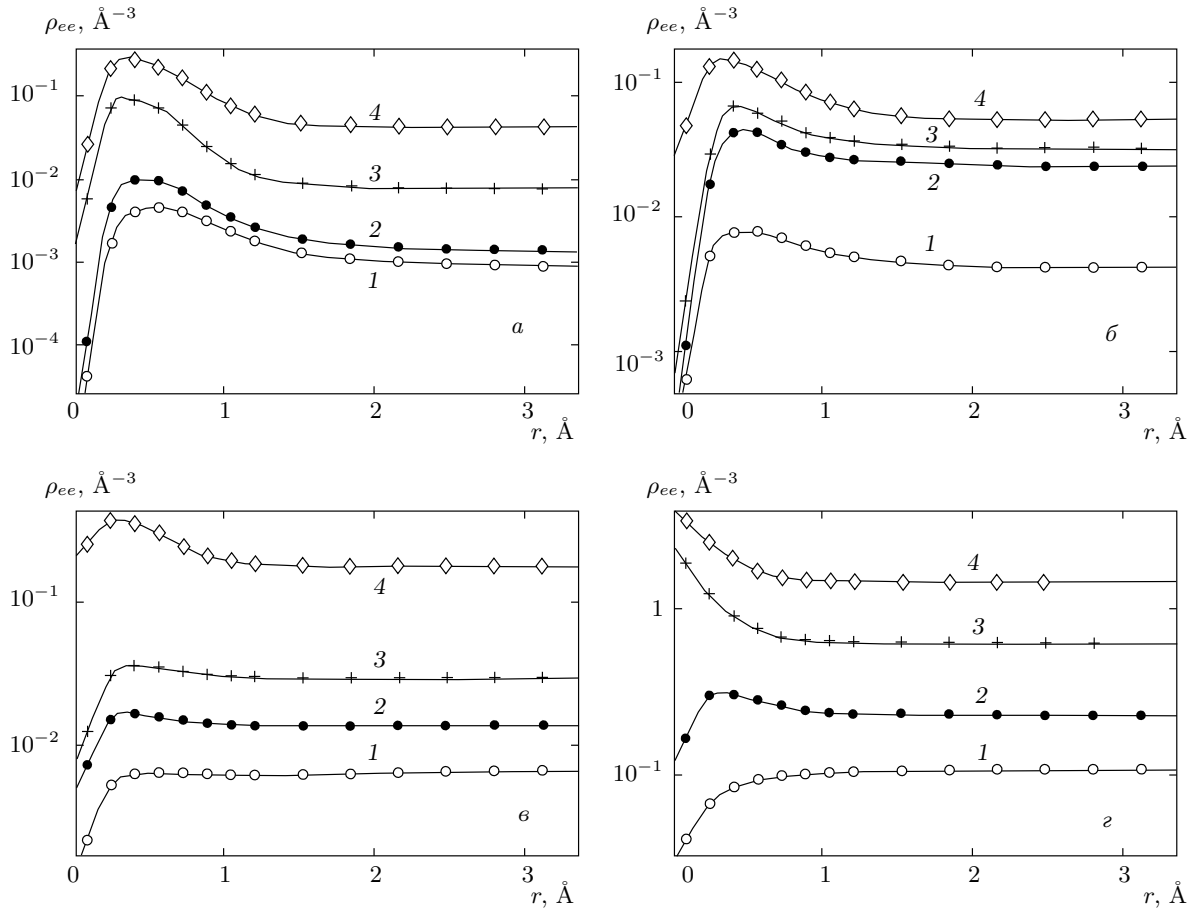


Рис. 16. Пространственные корреляционные функции электрон–электрон в гелиевой плазме. Нумерация кривых отвечает тем же термодинамическим условиям, как и на рис. 12 и 14

свою индивидуальность. Здесь необходимо учитывать коллективизацию электронов соседними атомами. При дальнейшем увеличении плотности следует ожидать качественного изменения механизма ионизации от термической ионизации к ионизации давлением. При ионизации давлением уже основное квантовое состояние системы содержит пространственно-делокализованные волновые функции, и поэтому зависимость степени ионизации от температуры нивелируется. По данным, представленным на рис. 12, можно проследить эволюцию радиального распределения электронов относительно ядер с нагреванием плазмы. Распределение на рис. 12г близко к пограничной области между режимом термической ионизации и ионизации давлением.

На рис. 13 представлены зависимости от плотности плазмы радиуса сферической области, центрированной на ядре и содержащей в среднем один или два электрона. Разница между размерами области,

которую занимает электрон, и аналогичной области в гипотетической однородной системе (штрихи) дает представление о локальном «сжатии» электронного газа, которое производит электрическое поле в окрестности ядра. Сравнение показывает, что существенное уменьшение объема, занимаемого электронами, происходит в результате их перехода из несвязных состояний в электронную оболочку атома (рекомбинации), рис. 13а. Этим объясняется резкое увеличение температурного коэффициента расширения и сжимаемости системы в области между ионизированными и неионизированными состояниями.

Как можно видеть на рис. 14, пространственные корреляции между ядрами имеют характерный радиус около 1 Å, который в исследованной области слабо зависит от температуры. Почти идеальное плато на зависимостях корреляционных функций на расстояниях больше характерного радиуса свидетельствует о сильном экранировании поля на

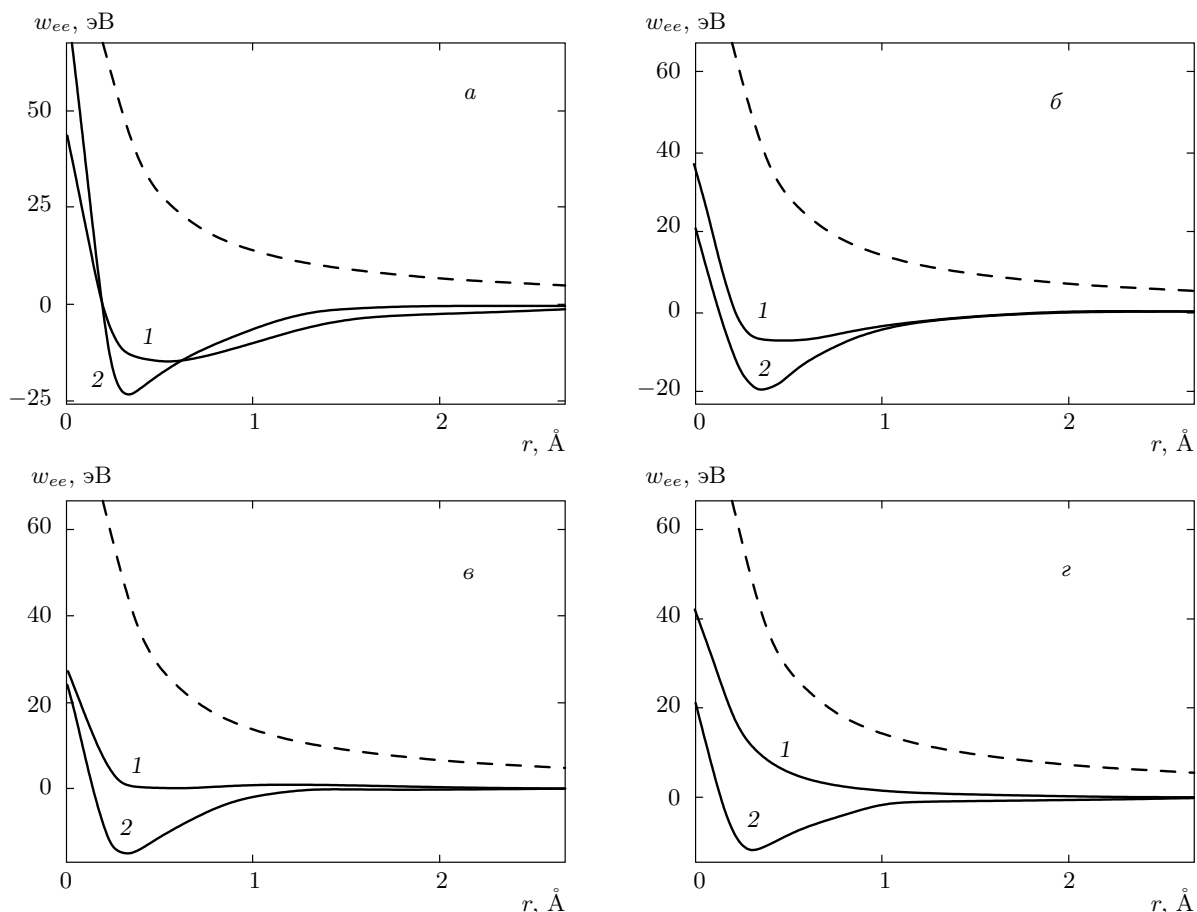


Рис. 17. Потенциал средней силы взаимодействия электрон–электрон в гелиевой плазме при различных значениях температуры и плотности: *a* — $T = 100000$ К, $\rho = 4.02 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ (1), $2.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2); *б* — $T = 140000$ К, $\rho = 2.17 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.20 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (2); *в* — $T = 200000$ К, $\rho = 3.36 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (1), $6.94 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ (2); *г* — $T = 400000$ К, $\rho = 5.45 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (1), $1.14 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ (2). Штрихи — кулоновская энергия взаимодействия двух точечных зарядов величиной $-e$

этих расстояниях. Экранирование делает взаимодействие между ядрами эффективно короткодействующим, что может сильно упростить построение приближенных моделей плазмы в этой области термодинамических состояний. В первом приближении плазма здесь может трактоваться как система электронейтральных сферических частиц размером около 1 \AA , погруженных в электронный газ. Взаимодействие между частицами описывается зависящим от температуры и плотности потенциалом средней силы

$$w_{nn}(r; T, \rho) = -k_B T \ln \frac{\rho_{nn}(r)}{\rho}. \quad (52)$$

Потенциал средней силы имеет смысл эффективной энергии взаимодействия, которая в вакууме привела бы к такому же характеру относительного дви-

жения частиц, выраженному в терминах корреляционных функций, как и для исходных частиц в среде. Потенциал средней силы в неявной форме включает опосредованные взаимодействия через частицы среды, а также квантовые эффекты, если речь идет о квантовых системах. О характере зависимости (52) от температуры и плотности можно судить по данным, представленным на рис. 15. При увеличении плотности плазмы и понижении температуры экранирование усиливается, а радиус взаимодействия уменьшается, т. е. меняется в ту же сторону, что и дебаевский радиус в разреженной плазме, растущий с температурой как $T^{1/2}$ и убывающий с плотностью как $\rho^{-1/2}$. Экранирование приводит к ослаблению эффективного взаимодействия между ядрами на 30–100 эВ или на несколько $k_B T$. Одной из

естественных аналитических форм задания эффективного взаимодействия в этой области можно рекомендовать экранированное кулоновское взаимодействие (потенциал Юкавы) с зависящими от температуры и плотности параметрами.

Корреляции между электронами качественно отличаются от корреляций между ядрами. На расстояниях около 0.5 \AA наблюдается максимум корреляционной функции $\rho_{ee}(r)$, отвечающий эффективно притяжению между электронами на этих расстояниях (рис. 16). Высота максимума существенно зависит от температуры. Аналогичного максимума на корреляционной функции в водородной плазме нет [40, 41]. Происхождение этого максимума обусловлено тройными корреляциями — одновременным втягиванием двух электронов в поле ядра гелия. Из-за сильного экранирования электрического поля электронов в первом приближении электроны можно рассматривать как электронейтральные частицы, приписав им зависящий от температуры псевдопотенциал с радиусом действия порядка 1 \AA . Потенциал средней силы для электронов,

$$w_{ee}(r; T, \rho) = -k_B T \ln \frac{\rho_{ee}(r)}{2\rho}, \quad (53)$$

имеет минимум глубиной около 20 эВ и радиус взаимодействия около 1 \AA (рис. 17). В единицах средней тепловой энергии, при повышении температуры от 100000 до 400000 К глубина минимума уменьшается от $2k_B T$ до долей $k_B T$.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. П. Григорьев, Т. В. Коваль, В. Р. Кухта и др., ЖТФ **78**, 104 (2008).
2. Д. С. Назаров, Г. Е. Озур, Д. И. Проскуровский, Изв. вузов, физика **37**, 100 (1994).
3. М. Ю. Крейндель, Е. А. Литвинов, Г. Е. Озур, Д. И. Проскуровский, Физика плазмы **17**, 1425 (1991).
4. Г. В. Иваненков, Физика плазмы **8**, 1184 (1982).
5. С. В. Шевкунов, В. Б. Федюшин, Рукопись, депонированная в ВИНТИ, № 2185-85 (1985).
6. А. В. Карелин, А. А. Синянский, С. И. Яковленко, КЭ **24**, 387 (1997).
7. А. М. Бойченко, А. В. Карелин, С. И. Яковленко, КЭ **22**, 547 (1995).
8. А. М. Boichenko, A. V. Karelin, and S. I. Yakovlenko, Laser Phys. **5**, 80 (1995).
9. A. V. Karelin, Laser Phys. **4**, 498 (1994).
10. R. J. De Young, Appl. Phys. Lett. **38**, 297 (1981).
11. В. А. Бушуев, Р. Н. Кузьмин, УФН **144**, 678 (1974).
12. А. М. Воинов, Л. Е. Довбыш, В. Н. Кривонос и др., Письма в ЖТФ **7**, 437 (1981).
13. А. М. Воинов, Л. Е. Довбыш, В. Н. Кривонос и др., ЖТФ **52**, 1346 (1982).
14. Дж. Нильсен, КЭ **33**, 1 (2003).
15. E. N. Avrorin, V. A. Lykov, P. A. Loboda, and V. Yu. Politov, Laser and Part. Beams **15**, 3 (1997).
16. А. М. Бойченко, Е. К. Бонюшкин, А. В. Карелин и др., КЭ **23**, 5 (1996).
17. J. Nilsen, *Legacy of the X-Ray Laser Program*, Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-LR-114552 (August 6, 1993); <http://www.llnl.gov/tid/lof/documents/pdf/222506.pdf>.
18. J. Nilsen, Energy and Technology Rev., p. 13-21 (November, 1994); <http://www.llnl.gov/etr/11.94.html> или http://www.llnl.gov/etr/pdfs/19_94.2.pdf.
19. D. L. Matthews, P. L. Hagelstein, M. D. Rosen et al., Phys. Rev. Lett. **54**, 110 (1985).
20. Р. П. Фейнман, А. Р. Хиббс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968).
21. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. **13**, 408 (1973).
22. В. С. Филинов, ТВТ **11**, 871 (1973).
23. В. С. Филинов, ТВТ **13**, 251 (1975).
24. В. С. Филинов, ТВТ **13**, 1146 (1975).
25. В. С. Филинов, ТВТ **14**, 245 (1976).
26. V. S. Filinov, Phys. Lett. A **54**, 259 (1975).
27. V. S. Filinov and G. E. Norman, Phys. Lett. A **55**, 219 (1975).
28. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, О. М. Рощиненко, в сб. *Современные проблемы статистической физики*, т. 1, под ред. И. Р. Юхновского, Наук. думка, Киев (1989), p. 292.
29. С. В. Шевкунов, ТВТ **28**, 1 (1990).
30. С. В. Шевкунов, в сб. *Современные проблемы статистической физики*, т. 1, под ред. И. Р. Юхновского, Наук. думка, Киев (1989), p. 379.
31. С. В. Шевкунов, ДАН **369**, 43 (1999).

32. С. В. Шевкунов, Рукопись, депонированная в ВИНТИИ, № 6370-B87 (1987).
33. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **118**, 36 (2000).
34. С. В. Шевкунов, ДАН **382**, 615 (2002).
35. С. В. Шевкунов, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. **43**, 1825 (2003).
36. С. В. Шевкунов, Матем. моделирование **2**, 3 (1990).
37. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Mol. Simulations **7**, 249 (1991).
38. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Mol. Simulations **7**, 205 (1991).
39. С. В. Шевкунов, ТВТ **29**, 45 (1991).
40. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **121**, 1098 (2002).
41. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **127**, 696 (2005).
42. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **132**, 453 (2007).
43. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **130**, 105 (2006).
44. С. В. Шевкунов, ДАН **409**, 176 (2006).
45. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977).
46. Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Мир, Москва (1983).
47. Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, Наука, Москва (1986).
48. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
49. T. L. Hill, *Statistical Mechanics. Principles and Selected Applications*, McGraw-Hill, New York (1956).
50. T. L. Hill, *Thermodynamics of Small Systems*, McGraw-Hill, New York–Amsterdam (1963).
51. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Справочник по атомной и молекулярной физике*, Атомиздат, Москва (1980).