

РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ПО ИМПУЛЬСАМ С УЧЕТОМ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ

А. Н. Старостин^{a,b}, В. К. Грязнов^{c,d}, Ю. В. Петрушевич^{a}*

^a ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
108840, Троицк, Москва, Россия

^b Московский физико-технический институт (государственный университет)
141707, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^c Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^d Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

Поступила в редакцию 8 июня 2017 г.

Дано обобщение теории квантовых асимптотик функции распределения частиц при больших значениях импульса на учет обмена энергией частицы и примеси. Показано появление дополнительной, по сравнению с известной степенной асимптотикой, экспоненциальной зависимости от кинетической энергии с эффективной температурой, большей температуры среды в отношении масс примеси к массе частицы для квантовой поправки к максвелловской функции распределения. Получены новые формулы для скоростей термоядерных и пороговых химических реакций, позволяющие избавиться от противоречий прежней теории при сравнении с экспериментом.

DOI: 10.7868/S0044451017110256

1. ВВЕДЕНИЕ

В плотных средах из-за высокой частоты соударений происходит уширение спектральной функции частиц аналогично тому, как это имеет место в теории уширения спектральных линий. Это приводит к наличию степенного «хвоста» в контуре спектральной линии, даже если в ядре линии имеет место доплеровское уширение. Указанный эффект приводит к квантовой поправке к максвелловской функции распределения частиц по импульсам и связан с соотношением неопределенности [1]. В плотной плазме это приводит к степенной асимптотике распределения по импульсам, обратно пропорциональной восьмой степени импульса [2, 3]. В настоящей работе проводится анализ влияния квантовых эффектов на функцию распределения по импульсам и скорости термоядерных и пороговых химических реакций. Показано, что расчеты скоростей термоядерных реакций при относительно низких температу-

рах $T < 100$ эВ с учетом квантовых поправок, полученных в рамках модели Лоренца, в которой частицы рассеиваются на неподвижных примесях, сильно превышают скорости реакций и нейтронный выход в реакции $d + d \rightarrow n + \text{He}^3$ для мишени UD_3 по сравнению с полученными в экспериментах [4], а также энерговыделение для реакций цикла C–N–O для недр Солнца [5]. Применение этой теории для расчета горения водорода в воздухе и кислороде дает хорошее согласие с экспериментом при повышенных давлениях и пониженных температурах, тогда как расчеты с использованием максвелловских функций распределения отличаются от эксперимента в этих условиях до трех порядков величины. В то же время расчет скорости реакции $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{O}$ сильно отличается от эксперимента [6], давая завышенное значение уже при давлении 0.026 атм и температурах 1300 К. В данной работе теория обобщается на предмет учета конечности массы рассеивающей частицы M и обмена энергией между частицей и рассеивателем. Это приводит к дополнительной экспоненциальной зависимости функции распределения по импульсам, но с эффективной температурой, пре-

* E-mail: yupetru@gmail.com

вышающей в M/m раз температуру среды. Использование новых формул для функции распределения и констант скоростей реакций позволяет снять столь серьезные противоречия прежней теории с экспериментом.

2. ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ НА ФУНКЦИЮ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ПО ИМПУЛЬСАМ В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ В РАМКАХ МОДЕЛИ ЛОРЕНЦЕВА ГАЗА

Для описания влияния квантовых эффектов на функцию распределения частиц по импульсам в плотных средах можно воспользоваться аппаратом кинетических функций Грина, изложенном в книге Каданова и Бейма [7] и диаграммной техники Келдыша [8,9] или обобщенных функций распределения частиц по энергиям и импульсам. В общем случае обобщенная функция распределения $f(E, \mathbf{p})$ может быть получена из выражения

$$f(E, \mathbf{p}) = -i \frac{n(E)}{2\pi} (G^R(E, \mathbf{p}) - G^A(E, \mathbf{p})), \quad (1)$$

$$G^A(E, \mathbf{p}) = [G^R(E, \mathbf{p})]^*. \quad (2)$$

Здесь $n(E)$ — числа заполнения частиц с «энергией» E ; G^R — запаздывающая, а G^A — опережающая функции Грина. Обобщенная функция распределения частиц по энергиям E и импульсам \mathbf{p} имеет следующий вид:

$$f(E, \mathbf{p}) = \int \exp(i(E\tau - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})) \times \langle \Psi^+(x_2) \hat{\Psi}(x_1) \rangle d\tau d\mathbf{r}. \quad (3)$$

Здесь $x = (\mathbf{r}, t)$; $t = t_1 - t_2$; $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$; $\Psi(x)$ — полевой оператор частицы в гейзенберговском представлении.

Функция распределения по импульсам получается из соотношения

$$f(\mathbf{p}) = \int f(E, \mathbf{p}) dE. \quad (4)$$

В случае идеального газа

$$f(E, \mathbf{p}) = n(E) \delta(E - \epsilon_p), \quad (5)$$

где $\epsilon_p = p^2/2m$. Однако для неидеального газа

$$f(E, \mathbf{p}) = n(E) \frac{1}{\pi} \times \frac{\text{Im} \Sigma^R(E, \mathbf{p})}{[E - \epsilon_p - \text{Re} \Sigma^R(E, \mathbf{p})]^2 + [\text{Im} \Sigma^R(E, \mathbf{p})]^2}. \quad (6)$$

Обозначим $\text{Im} \Sigma^R(E, \mathbf{p})$ как $\gamma(E, \mathbf{p})$ и $\text{Re} \Sigma^R(E, \mathbf{p})$ как $\Delta(E, \mathbf{p})$, где $\Sigma^R(E, \mathbf{p})$ — оператор энергии с собственно-энергетической частью. Тогда

$$f(E, \mathbf{p}) = n(E) \delta_\gamma(E, \mathbf{p}), \quad (7)$$

$$\delta_\gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(E, \mathbf{p})}{[E - \epsilon_p - \Delta(E, \mathbf{p})]^2 + [\gamma(E, \mathbf{p})]^2}. \quad (8)$$

Функцию (8) можно назвать спектральной функцией частицы. Степенные хвосты в функции распределения по импульсам появляются по причине отличия ширины спектральной функции γ от нуля. Конкретный вид γ и Δ определяется природой межчастичного взаимодействия. При конечной плотности газа выражение для функции распределения частиц по импульсам в области больших импульсов $\epsilon_p \gg [T, \gamma, \Delta]$ наряду с резонансной, максвелловской зависимостью, содержит поправку

$$f_{qp}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi \epsilon_p^2} \int_{-\infty}^{\infty} n(E) \gamma(E, \mathbf{p}) dE. \quad (9)$$

Как было показано в работе [10] в рамках модели Лоренца, в которой частица рассеивается на неподвижных примесях, выражение для γ может быть записано в виде

$$\gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{N\pi}{\hbar^4} \int |U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)|^2 \delta_\gamma(E, \mathbf{p}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}, \quad (10)$$

где $U(\mathbf{p})$ — фурье-образ потенциала взаимодействия частицы с примесным рассеивателем, N — концентрация примесей. В случае, когда Δ не является пренебрежимо малой величиной, уравнение (10) должно решаться [3, 7] согласованно с

$$\Delta(E, \mathbf{p}) = P \int \frac{\gamma(x, \mathbf{p})}{x - E} dx + \Sigma^{HF}(E, \mathbf{p}). \quad (11)$$

Здесь P — главное значение интеграла, а $\Sigma^{HF}(E, \mathbf{p})$ — собственно-энергетическая часть в приближении Хартри–Фока [7]. Из (9), (10) при предположении, что δ_γ может быть заменена дельта-функцией, становится возможным получить $\gamma(E, \mathbf{p}) = \hbar n \sigma_t(\mathbf{p}) \sqrt{2E/m}$. Здесь σ_t обозначает полное сечение рассеяния. Приведем явные выражения для ширины и асимптотики функции распределения по импульсам с учетом квантовых поправок в рамках обсуждаемой модели Лоренца [10, 11],

$$\gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{\hbar N}{2} \sigma_t(p, p_1(E)) \sqrt{\frac{2E}{m}}. \quad (12)$$

Эта оценка находится в соответствии с представлением о параметре $\gamma \sim h\nu$ как о величине, пропорциональной частоте упругих соударений. В самом деле, выражение для полного сечения рассеяния в борновском приближении имеет следующий вид [12]:

$$\sigma_t = \int d\Omega \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int dV U(r) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right|^2, \quad (13)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_1$, $p_1 = (2Em)^{1/2}$. При больших значениях импульса ($\epsilon_p \gg T$) асимптотическое выражение для $f(\mathbf{p})$ в невырожденном пределе имеет вид

$$f(p) = \exp\left(\frac{\mu}{T}\right) \times \left(\exp\left(-\frac{\epsilon_p}{T}\right) + \frac{\hbar N T \sigma_t(p)}{2\pi \epsilon_p^2} \sqrt{\frac{\pi T}{2m}} \right). \quad (14)$$

В формуле (14) μ — химический потенциал, а второе слагаемое в скобках представляет собой искомую квантовую поправку к функции распределения частиц по импульсам, обусловленную соударениями. Как видно, относительный вклад этой поправки возрастает по мере роста плотности частиц и снижения температуры и при некоторых условиях может оказаться определяющим. В частности, для электронного газа, для которого с учетом дебаевского экранирования $\sigma_t \sim \epsilon_p^{-2}$, указанная поправка зависит от импульса по закону $\sim p^{-8}$ [1–3]. В работах [3, 5, 13, 14] приводились оценки для скорости термоядерных реакций синтеза с учетом полученных квантовых поправок. В общем случае скорость реакции выражается диаграммой Фейнмана [15, 16], которая представляется десятикратным неприводимым интегралом по энергиям и импульсам. В этих же работах показано, что для невырожденных частиц, каковыми в этом примере являются дейтроны и другие частицы, участвующие в реакциях синтеза, выражение для скорости реакции упрощается и приводится к виду

$$\langle \sigma V \rangle = \iint f(\epsilon_a) f(\epsilon_b) V_{ab} \sigma_f(\epsilon_p) d^3 p_a d^3 p_b. \quad (15)$$

Здесь a и b — реагирующие частицы. Зависимость сечения реакции от кинетической энергии в системе центра масс может быть представлена в виде [17]

$$\sigma_f(\epsilon_p) = \frac{S(\epsilon_p)}{\epsilon_p} \exp\left[-\pi \sqrt{\frac{E_G}{\epsilon_p}}\right], \quad (16)$$

при этом параметр Гамова равен

$$E_G = \frac{2\mu_{ab} m_p Z_1^2 Z_2^2 e^4}{\hbar^2} = 4\mu_{ab} \frac{m_p}{m_e} Z_1^2 Z_2^2 \text{Ry}, \quad (17)$$

где $\text{Ry} = m_e e^4 / 2\hbar^2$.

Подставляя в (15) выражения типа (14), для скорости экзотермической реакции в этом приближении получим, пренебрегая вкладом от произведения квантовых поправок из (14):

$$\langle \sigma V \rangle_{quant} = \langle \sigma V \rangle_a + \langle \sigma V \rangle_b = \frac{8 \cdot 5!}{\pi^6 (1 + \delta_{ab})} \frac{S(0)}{E_G} \times \times \frac{\hbar e^4 \mu_{ab}^2}{E_G^2} \left[\frac{Z_a^2}{m_a} \sum_l \frac{N_l Z_l^2}{\mu_{al}^2} + \frac{Z_b^2}{m_b} \sum_l \frac{N_l Z_l^2}{\mu_{bl}^2} \right]. \quad (18)$$

Здесь при суммировании в первом слагаемом $l \neq a$, а во втором $l \neq b$, δ_{ab} — символ Кронекера.

Из (18) можно оценить константу скорости синтеза дейтронов $d + d \rightarrow n + \text{He}^3$ для значений астрофизического фактора $S(0) = 49.6$ кэВ/б и гаммовской энергии $E_G = 99.9$ кэВ. Расчет сечения рассеяния при энергии равной E_G , а также оценки скоростей частиц, входящих в скорости реакции, показывают, что столкновительная ширина γ при концентрации рассеивающих частиц порядка $3 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, окажется около 10^{-6} эВ и константа скорости реакции оказывается порядка $10^{-28} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$. Такая оценка дает сильно завышенное значение выхода нейтронов по сравнению с наблюдениями в плотной плазме, сжатой до плотностей 50–100 г/см³ и разогретой до температур 50–100 эВ [4], с учетом радиального распределения термоядерной реакции в мишени UD^3 , помещенной в фокусе сферического заряда взрывчатого вещества. Так, расчеты по формуле (18) дают нейтронный выход порядка 10^{14} штук за импульс, тогда как в эксперименте наблюдаются значения выхода около $6 \cdot 10^4 - 3 \cdot 10^{10}$.

Расчеты по классическим формулам Б. Н. Козлова [18] без учета квантовых поправок дают значения констант скоростей реакций, на 3–7 порядков меньше, чем по формулам (18), в указанном диапазоне плотностей и температур и как минимум на два порядка меньше, чем в приведенном эксперименте. Расчеты энерговыделения в недрах Солнца [5] с использованием формул (18) показывают, что для цепочек p - p влияние квантовых эффектов сильно сказывается на реакциях с тяжелыми частицами ($\text{He}^3 + \text{He}^3 \rightarrow \text{He}^4 + 2p$, $\text{He}^3 + \text{He}^4 \rightarrow \text{Be}^7 + \gamma$), оставляя суммарное энерговыделение неплохо совпадающим со стандартной моделью. Для цикла C–N–O расчеты с квантовыми эффектами завышают энерговыделение до десяти порядков величины по сравнению с общепринятым значением, составляющим 0.015 от энерговыделения от цепочек p - p . В работах [13, 19–22] рассматривалось применение теории квантовых эффектов для расчета скоростей химических реакций, обладающих порогом в пространстве

кинетических энергий в системе центра масс. Подставим полученные формулы для функции распределения в выражение для константы скорости реакции (15) и получим

$$\begin{aligned} \langle \sigma V \rangle &= \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \int_0^\infty d\epsilon_a \sqrt{\epsilon_a} (f_0(\epsilon_a) + f_{qp}(\epsilon_a)) \times \\ &\times \int_0^\infty d\epsilon_b \sqrt{\epsilon_b} (f_0(\epsilon_b) + f_{qp}(\epsilon_b)) V_{ab} \sigma(\epsilon_p) = \\ &= \frac{\langle \sigma V \rangle_{clas}}{1 + \delta_{ab}} \left[1 + \frac{\hbar}{2\sqrt{2\pi k}(r+l)} \frac{\mu_{ab}^{t+1/2} P}{E_r \sqrt{T}} \times \right. \\ &\times \left. \exp\left(\frac{E_r}{kT}\right) \sum_l C_l \left(\frac{\sigma_{0al}}{m_a \mu_{al}^t} + \frac{\sigma_{0bl}}{m_b \mu_{bl}^t} \right) \right] = \\ &= \frac{\langle \sigma V \rangle_{clas}}{1 + \delta_{ab}} \left(1 + \phi \exp\left(\frac{E_r}{kT}\right) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь $\sigma(\epsilon_p)$ — сечение химической реакции имеет пороговую (E_r — пороговая энергия для экзотермической реакции, $Q = E_r + E_0$, E_0 — теплота реакции) зависимость от кинетической энергии частиц в системе центра масс; $\sigma_l(\epsilon_a)$ — сечение рассеяния на примеси, которое зависит от кинетической энергии степенным образом:

$$\sigma_l(\epsilon_p) = \sigma_{0a}(E_r) \left(\frac{E_r}{\epsilon_{pal}} \right)^t, \quad (20)$$

где ϵ_{pal} — кинетическая энергия частицы a в системе центра масс при упругом ее столкновении с частицей l , $\sigma_{0a}(E_r)$ — сечение упругих столкновений при кинетической энергии сталкивающихся частиц, равной пороговой.

В формуле (19) параметр $t = 1/11$ [19], $C_l = N_l/N$ — доля компоненты l в смеси газов, m_a — масса частицы сорта a , μ_{al} — приведенные массы частиц сорта a и l , P — давление газа, ϕ — величина квантовой поправки при вычислении константы скорости реакции. Суммирование проводится по всем компонентам смеси, не считая «своей» компоненты. Расчеты времени индукции самовоспламенения смесей водорода с кислородом и с воздухом при повышенных давлениях ($p > 5$ атм) и относительно низких температурах ($T < 1000$ К) позволили достичь хорошего согласия с экспериментом [23], тогда как расчеты с использованием максвелловской функции распределения отличаются от эксперимента, завышая время индукции самовоспламенения на три порядка величины при давлениях около 100 атм и температурах ниже 800 К [13, 19–22]. В то же время константа скорости реакции $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{O}$,

рассчитанная с использованием формул (19), сильно отличается от эксперимента [4], она имеет завышенное значение уже при давлении 0.026 атм и температурах ниже 1500 К. Это связано с аномально большой величиной пороговой энергии для этой реакции, $E_r = 47$ ккал/моль.

3. ВЛИЯНИЕ ОБМЕНА ЭНЕРГИЕЙ ЧАСТИЦ С РАССЕИВАЮЩИМИ ПРИМЕСЯМИ С КОНЕЧНОЙ МАССОЙ НА КВАНТОВУЮ АСИМПТОТИКУ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ИМПУЛЬСАМ

В данном разделе рассматривается обобщение модели Лоренца, в которой примеси являются неподвижными и их масса стремится к бесконечности, для учета конечности их массы и обмена энергией между частицами и примесями. Фейнмановская диаграмма для оператора Σ_{ab}^{+-} , описывающего скорость «ухода» частиц сорта a с заданными значениями E и p_1 из-за столкновений с частицами сорта $b = l$ с потенциалом взаимодействия $V_{q\omega}^{ab}(r)$ (в нашем случае — экранированный кулоновский потенциал), показана на рис. 1.

Диаграмма изображена в технике Келдыша [17], изложенной в [24]. Здесь $G_a^{-+}(E_a, \mathbf{p}_a)$ — фурье-образ кинетической функции Грина частицы сорта a в среде. В равновесии она выражается через числа заполнения частиц $n(E)$ (верхний знак для фермионов, нижний — для бозонов, соответственно и числа заполнения фермиевские или бозевские в зависимости от спина [6]) и разность запаздывающей G^R и опережающей G^A функций Грина в среде, влияние которой учитывается массовым оператором [24]:

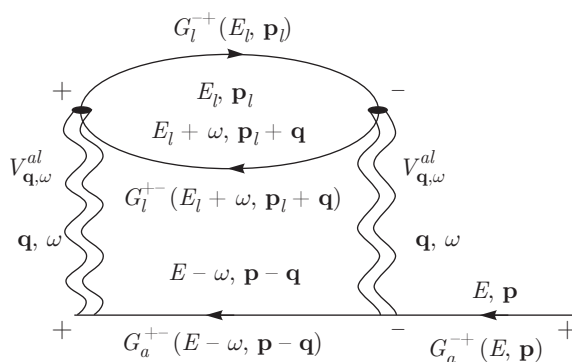


Рис. 1. Фейнмановская диаграмма для оператора «ухода» Σ_{al}^{+-}

$$G_a^{-+}(E_a, \mathbf{p}_a) = \mp n_a(E_a)[G_a^R(E_a, \mathbf{p}_a) - G_a^A(E_a, \mathbf{p}_a)]. \quad (21)$$

Кинетическая функция Грина $G_a^{+-}(E_a, \mathbf{p}_a)$ частицы сорта a имеет вид

$$G_a^{+-}(E_a, \mathbf{p}_a) = [1 \mp n_a(E_a)][G_a^R(E_a, \mathbf{p}_a) - G_a^A(E_a, \mathbf{p}_a)]. \quad (22)$$

Величина Σ_{ab}^{+-} в случае невырожденных частиц определяет ширину спектральной функции $\gamma(E, \mathbf{p})$. Частицы сорта l предполагаются классическими с шириной, равной нулю. Величина ω при значении импульса частицы сорта a , стремящегося к бесконечности, равна $\omega = m_a/M_l \epsilon_{ap}$.

Оценивая диаграмму на рис. 1, получим выражение (ср. с (12))

$$\gamma(E, \mathbf{p}) = \frac{\hbar}{2} \frac{4\pi(e^2 Z_l Z_a)^2 N_a}{\epsilon_{ap}^2} \sqrt{\frac{2(E - \omega)}{m_a}}. \quad (23)$$

Вместо ϵ_{ap} в дальнейшем будем использовать обозначение ϵ . Смысл пороговой энергии ω состоит в том, что при передаче от частицы a импульса p_a частице сорта l последняя приобретает энергию $\omega = m_a/M_l E_a(p)$, а значит, полная энергия частицы сорта a должна быть не меньше этой величины. Используя определение (9), для функции распределения частиц сорта a в невырожденном пределе получим с учетом (23)

$$f_{qp}(\epsilon) = \frac{\hbar}{2} \frac{4\pi \sum_l (e^2 Z_l Z_l)^2 N_l}{\pi \epsilon^4} \sqrt{\frac{2}{m_a}} \times \int_{\omega}^{\infty} \exp\left(\frac{\mu - E}{kT}\right) \sqrt{E - \omega} dE = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right) \times \frac{\sqrt{2\pi} \hbar (kT)^{3/2} \sum_l (e^2 Z_l Z_l)^2 N_l}{\sqrt{m_a} \epsilon^4} \times \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT \nu_{al}}\right), \quad (24)$$

где $\nu_{al} = M_l/m_a$. По сравнению с чисто степенной асимптотикой (14) здесь появляется дополнительный экспоненциальный множитель с эффективной температурой, большей температуры среды T в M_l/m_a раз. В модели Лоренца с неподвижными примесями бесконечной массы этот множитель обращается в единицу и получается старая формула (14). Вычисляя скорость термоядерной реакции с помощью полученных формул, имеем (ср. (18))

$$\langle \sigma V \rangle_{quant} = 4 \frac{S(0) \hbar e^4 \mu_{ab}^2}{E_G^3 (1 + \delta_{ab})} \times \sum_l N_l Z_l^2 \left[\frac{Z_a^2 J_l^a}{m_a^3} + \frac{Z_b^2 J_l^b}{m_b^3} \right], \quad (25)$$

где

$$J_l^a = \int_0^{\infty} \frac{d\epsilon_c}{\epsilon_c^4} \exp\left(-\pi \sqrt{\frac{E_G}{\epsilon_c}} - \frac{\epsilon_c}{T_a^*}\right) \approx \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left(\frac{2E_G}{\pi T_a^*}\right)^{11/6} \exp\left(-4.0536 \left[\frac{E_G}{T_a^*}\right]^{1/3}\right),$$

$$T_a^* = \lambda_{al} T, \quad T_b^* = \lambda_{bl} T, \quad \lambda_{al} = \frac{M_l}{m_a} \frac{m_b}{M_{ab}},$$

$$\lambda_{bl} = \frac{M_l}{m_a} \frac{m_b}{M_{ab}}, \quad M_{ab} = m_a + m_b.$$

Аналогичное обобщение можно получить и для формул, описывающих химическую кинетику в плотных газах (ср. (19)) для эндотермического случая:

$$\langle \sigma V \rangle = \langle \sigma V \rangle_{clas} + \langle \sigma V \rangle_{quant} = \frac{\langle \sigma V \rangle_{clas}}{1 + \delta_{ab}} \times \left\{ 1 + \frac{\hbar \sqrt{\mu_{ab} T}}{2 E_r^2 \sqrt{2\pi}} \sum_l N_l \left(\frac{M_{ab}}{M_l}\right)^t \left[\frac{\sigma_{tot}^{al}}{m_a} T_a^* \left(\frac{M_{al}}{m_b}\right)^t \times \exp\left(E_r \frac{T_a^* - T}{T_a^* T}\right) + (a \leftrightarrow b) \right] \right\}, \quad (26)$$

$$K_{ab} = \frac{K_{ab}^{clas}}{1 + \delta_{ab}} \times \left(1 + \sum_l \left[\phi_l \exp\left(E_r \frac{T_a^* - T}{T_a^* T}\right) + (a \leftrightarrow b) \right] \right), \quad (27)$$

$$K_{ab}^{clas} = 2 \sqrt{\frac{2T}{\pi \mu_{ab}}} \sigma_r^{ab} \frac{E_r}{T} \exp\left(-\frac{Q}{T}\right), \quad (28)$$

$$Q = E_r + E_0, \quad t = \frac{1}{11}.$$

Расчеты по вновь полученным формулам для скоростей термоядерных реакций демонстрируют существенную зависимость последних от температуры среды в отличие от (18), в которой такая зависимость проявляется через величины зарядов частиц a, b, l .

В таблице приведены оценочные значения констант скоростей для реакции $d + d \rightarrow n + \text{He}^3$ для описанного выше случая мишени из UD_3 и оценочных выходов нейтронов.

Приведем оценки времени установления равновесной функции распределения на «хвостах», т.е.

Таблица. Константы скорости и оценочные выходы нейтронов реакции $d + d \rightarrow n + \text{He}^3$ для мишени UD_3

T	1	10	30	100
$K_{D-D}^{new}/[\rho(Z_l/10)^2]$	$2.8 \cdot 10^{-44}$	$6.7 \cdot 10^{-34}$	$8.7 \cdot 10^{-33}$	$1.6 \cdot 10^{-31}$
$K_{D-D}^{old}/[\rho(Z_l/10)^2]$	$2 \cdot 10^{-29}$	$2 \cdot 10^{-29}$	$2 \cdot 10^{-29}$	$2 \cdot 10^{-29}$
K_{D-D}^{clas}	$5.4 \cdot 10^{-94}$	$6.8 \cdot 10^{-51}$	$2.8 \cdot 10^{-43}$	$3.3 \cdot 10^{-31}$
$N_n^{new}/[\rho^3 V \tau (Z_l/10)^2]$	$3.1 \cdot 10^{-57}$	$3.9 \cdot 10^2$	$1.1 \cdot 10^4$	$9.8 \cdot 10^5$
$N_n^{old}/[\rho^3 V \tau (Z_l/10)^2]$	$1.2 \cdot 10^8$	$1.2 \cdot 10^8$	$1.2 \cdot 10^8$	$1.2 \cdot 10^8$
$N_n^{clas}/[\rho^2 V \tau]$	$3.1 \cdot 10^{-57}$	$3.8 \cdot 10^{-14}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-6}$

Примечание. Здесь V [см³] — объем, τ [10⁻⁷ с] — время нейтронного импульса, ρ [г/см³] — плотность.

при кинетических энергиях, соответствующих точке перевала в интегралах J_l^a . Энергия в этой точке соответствует величине $\epsilon_0 = ((\pi^2/4)T_*^2 E_G)^{1/3}$. Для времени τ получим [1]

$$\tau = \frac{1}{N_l \sigma_{Coul}(\epsilon_0) v_T},$$

$$\sigma_{Coul}(\epsilon_0) = \frac{4\pi e^4 Z_a^2 Z_l^2}{\epsilon_0^2}, \quad v_T = \sqrt{\frac{2T}{m_a}}.$$

Длина пробега l при такой энергии равна

$$l = \tau v(\epsilon_0) = \frac{1}{N_l \sigma_{Coul}(\epsilon_0)} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{T}}.$$

Для мишени UD_3 при $\rho = 30$ г/см³ и $T = 30$ эВ получим ($Z_l > 5$)

$$\epsilon_0 = 9.23 \text{ кэВ}, \quad T_* = 1.785 \text{ кэВ}, \quad \tau < 2.6 \cdot 10^{-11} \text{ с},$$

$$l < 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ см}.$$

Таким образом, за времена 10^{-8} – 10^{-6} с функция распределения успевает прийти к равновесию на хвостах.

Заметим, что приведенная константа скорости реакции для «старых» квантовых поправок не зависит от температуры и существенно завышает нейтронный выход при температурах до 100 эВ, тогда как для «новых» формул имеет место заметная зависимость от температуры. При температурах выше 100 эВ расчет по классическим формулам Козлова [18] начинает сравниваться с величиной квантовой поправки. Новые расчетные данные по выходу нейтронов существенно лучше согласуются с экспериментом [4].

На рис. 2 представлены значения приведенного нейтронного выхода, деленного на произведение

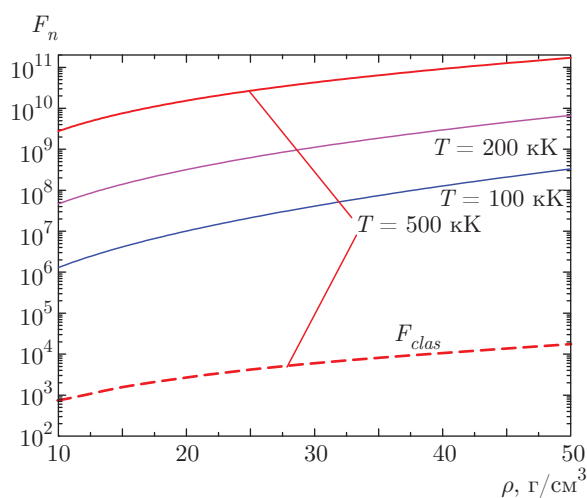


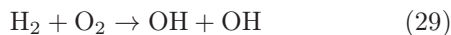
Рис. 2. Приведенный нейтронный выход для мишени ErD_3 для различных температур в зависимости от плотности. Для температуры 500 кК приведены данные, полученные по формулам [18] (штриховая линия)

объема системы и времени в единицах 10^{-7} с, для мишени из ErD_3 при различных плотностях и температурах.

Отметим, что вещество при указанных выше плотностях и температурах представляет собой неидеальную, вырожденную (по электронам) плазму, и надежные данные по уравнению состояния, а также зарядовому составу (величина Z_l зависит от плотности и температуры так же, как и количество ядер дейтерия, способных участвовать в термоядерных реакциях) в настоящее время отсутствуют. В данной работе расчетная оценка зарядового состава многокомпонентной неидеальной плазмы ErD_3 была выполнена на основе работ [25–27]. Представляет интерес измерение нейтронного выхода для

мишени из ErD_3 при использовании для обжата мишени взрывчатого вещества или мощного лазера при параметрах, позволяющих разогрев вещества до умеренных температур, порядка 30–50 эВ, в отличие от принятых традиционно в ГДТС или ЛТС киловольтных температур вещества. Оценки, выполненные для скоростей и величин энерговыделений термоядерных реакций в недрах Солнца, показывают, что роль квантовых поправок пренебрежима для цепочек p - p и не создает неразрешимых противоречий для цикла C-N-O по сравнению с классическими расчетами и наблюдениями нейтринных потоков, в отличие от расчетов по формулам со «старыми» квантовыми поправками (ср. (18)). Так, для реакции $p + \text{N}^{14} \rightarrow \text{O}^{15} + \gamma$ имеем значения констант реакции в центре Солнца по классическим формулам [28] $4.3 \cdot 10^{-42} \text{ см}^3/\text{с}$, расчет по «старой» модели Лоренца дает величину $1.2 \cdot 10^{-30} \text{ см}^3/\text{с}$, а расчет по «новым» формулам — $3.8 \cdot 10^{-42} \text{ см}^3/\text{с}$. Сравнение последнего результата с «классическим» означает, что проблема цикла C-N-O требует дальнейших исследований.

Результаты расчета с использованием «новых» формул, описывающих квантовые поправки для скоростей химических реакций, необходимо сравнить с результатами работ [13, 19–22], в которых было показано, что учет квантовой поправки к константе скорости реакции



приводит к разумному согласию расчетного времени воспламенения водородсодержащей смеси с опубликованными ранее результатами измерений при высоких давлениях (30–100 атм) и сравнительно низких температурах (700–900 К). Возникает вопрос, в какой мере уточнение квантовых поправок, представленное в настоящей работе, скажется на полученных ранее результатах?

Рассчитанный по формулам (27), (28) поправочный множитель $\delta = K_{ab}/K_{ab}^{clas}$ с учетом эффекта изменения эффективной температуры вследствие различия масс сталкивающихся молекул представлен на рис. 3. На этом же рисунке показана величина поправочного множителя, рассчитанная без учета этого эффекта. Видно, что, как и раньше, квантовая поправка резко возрастает с уменьшением температуры. Некоторое различие самих значений не принципиально, поскольку, как показано в работах [29–32], в настоящее время точно не известно значение величины потенциального барьера E_r . В случае реакции

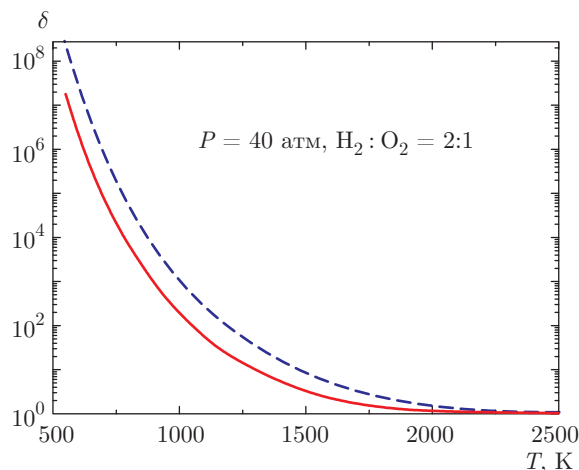
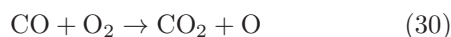


Рис. 3. Зависимости отношения δ полной скорости реакции с учетом квантовой поправки к классическому значению константы скорости реакции $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{OH}$ от температуры газовой смеси. Сплошная линия — с учетом эффекта изменения эффективной температуры вследствие различия масс сталкивающихся молекул, штриховая линия — без учета этого эффекта. $E_r = 29.3 \text{ ккал/моль}$

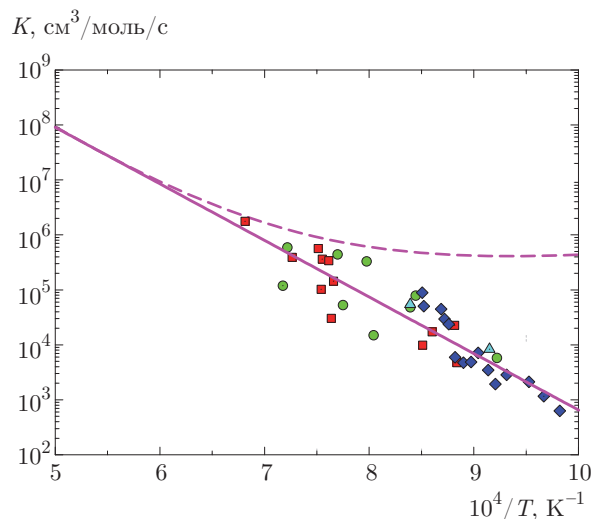


Рис. 4. Зависимости величины константы скорости реакции $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{O}$ от температуры газовой смеси. Сплошная линия — в квантовых поправках учтен эффект изменения эффективной температуры вследствие различия масс сталкивающихся молекул, штриховая линия — этот эффект в квантовых поправках не учтен. Точки — эксперимент [6]. $E_r = 47 \text{ ккал/моль}$, $P = 0.026 \text{ атм}$, $\text{H}_2 : \text{O}_2 : \text{CO} : \text{Ar} = 1 : 1 : 1 : 97$

квантовая поправка приводила к очень сильному увеличению константы скорости этой реакции даже при малых значениях давления. На рис. 4 представлены зависимости величины константы скорости реакции (30) от температуры газовой смеси.

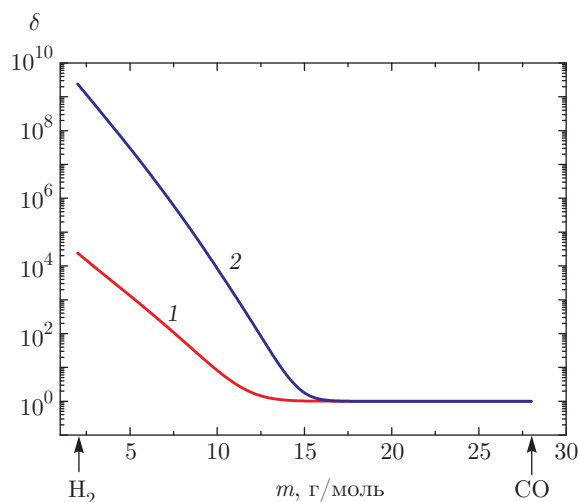


Рис. 5. Зависимость поправочного множителя δ к величине константы скорости реакции $M + O_2$ от величины молекулярной массы молекулы M . Крайняя левая точка оси абсцисс соответствует молекулярному водороду, крайняя правая — CO. Расчеты выполнены для энергии барьера 29.3 ккал/моль (кривая 1) (соответствующего реакции $H_2 + O_2 \rightarrow 2OH$) и 47 ккал/моль (кривая 2) (соответствующего реакции $CO + O_2 \rightarrow CO_2 + O$). $T = 700$ К, $P = 40$ атм

Видно, что неучет эффекта изменения температуры в случае реакции молекул с близкими массами приводит к значительному завышению величины константы скорости химической реакции при температуре ниже 1500 К даже при давлениях 0.026 атм, а учет этого эффекта приводит к хорошему согласию теории и эксперимента.

Интересно проанализировать влияние различия масс сталкивающихся молекул на величину квантовой поправки, так как от этого зависит эффективная температура экспоненциальной зависимости «новой» константы скорости реакции, полученной с учетом обмена энергией между частицами и рассеивателями. На рис. 5 представлена зависимость квантовой поправки к величине константы скорости реакции $M + O_2$ от молекулярной массы m молекулы M . Крайняя левая точка оси абсцисс соответствует молекулярному водороду, крайняя правая — CO. Расчеты выполнены для энергии барьера 29.3 ккал/моль (соответствующего реакции $H_2 + O_2 \rightarrow 2OH$) и 47 ккал/моль (соответствующего реакции $CO + O_2 \rightarrow CO_2 + O$). При возрастании массы молекулы M от 2 г/моль до 15 г/моль величина квантовой поправки становится пренебрежимой. Такая зависимость от массы представляется естественной, так как эффективная температура убывает с уменьшением отношения M/m .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены результаты обобщения теории квантового распределения частиц по импульсам в плотных газах и плазме. Показано, что учет обмена энергией частицы с рассеивателем конечной массы приводит к экспоненциальному множителю при полученной впервые Галицким [1] степенной зависимости квантовой поправки к максвелловской функции распределения. В показателе экспоненты фигурирует эффективная температура, которая больше температуры среды T в M_l/m_a раз. Это приводит к существенной температурной зависимости констант скоростей термоядерных и пороговых химических реакций, в отличие от прежних расчетов по модели Лоренца, в которой рассеивающие частицы предполагались неподвижными. «Новая» теория позволяет получить разумное согласие со взрывными экспериментами с мишенями из UD_3 , в которых наблюдается заметный выход термоядерных нейтронов при низких температурах среды, при которых выход по классическим формулам Козлова [18] оказывается существенно ниже. Удастся снять противоречия между наблюдениями и расчетами по «старым» формулам с квантовыми поправками для термоядерных реакций в недрах Солнца, а также для высокопороговых химических реакций типа $CO + O_2 \rightarrow CO_2 + O$.

Авторы выражают глубокую благодарность коллегам, замечания и советы которых позволили продвинуться в понимании изучаемого вопроса: П. Д. Гаспаряну, А. В. Еремину, М. В. Жерноклетову, Р. И. Ильяеву, И. В. Кочетову, И. В. Ломоносову, С. П. Медведеву, А. Л. Михайлову, В. Б. Минцеву, В. Г. Рогачеву, В. П. Рябову, В. Е. Фортину, В. С. Филинову, В. В. Хрусталеву, В. Е. Черковцу, Н. Н. Шилкину.

Работа выполнена при частичной поддержке Росатома (контракт № Н.4х.241.9Б.17.1015), Программы «Научный фонд им. Д. И. Менделеева Томского государственного университета» и Программы президиума РАН № 11П. Грязнов В. К. и Старостин А. Н. выражают также признательность за поддержку РНФ (грант № 16-12-10511).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. М. Галицкий, В. В. Якимец, ЖЭТФ **51**, 957 (1966).

2. J. C. Kimball, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8**, 1513 (1975).
3. A. N. Starostin, A. V. Mironov, N. L. Aleksandrov, N. J. Fisch, and R. M. Kulsrud, *Physica A* **305**, 287 (2002).
4. В. А. Александров, В. М. Горбачев, А. Л. Михайлов, Н. А. Попов, Г. С. Смирнов, Л. М. Тимонин, *Труды РФЯЦ–ВНИИЭФ* вып. 8, с. 102 (2005).
5. A. N. Starostin, V. I. Savchenko, and N. J. Fish, *Phys. Lett. A* **274**, 64 (2000).
6. T. Koike, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **64**, 1726 (1991).
7. L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, Benjamin, New York (1962).
8. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
9. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, т. 9, Физматлит, Москва (2001).
10. A. N. Starostin, N. L. Aleksandrov, A. V. Mironov, and M. V. Shchipka, *Contrib. Plasma Phys.* **41**, 299 (2001).
11. A. N. Starostin, A. G. Leonov, Yu. V. Petrushevich, and V. K. Roerich, *Physica A* **340**, 483 (2004).
12. A. N. Starostin, N. L. Aleksandrov, A. M. Conchakov, A. M. Okhrimovskyy, and M. V. Shchipka, *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 93 (1999).
13. А. В. Елецкий, А. Н. Старостин, М. Д. Таран, *УФН* **175**, 299 (2005).
14. А. Н. Старостин, А. Г. Леонов, Ю. В. Петрушевич, В. К. Рерих, *Физика плазмы* **31**, 1 (2005).
15. N. J. Fisch, M. G. Gladush, Yu. V. Petrushevich, P. Quarati, and A. N. Starostin, *Eur. Phys. J. D* **66**, 154 (2012).
16. M. Coraddu, M. Lissia, G. Mezzorani et al., *Physica A* **340**, 496 (2004).
17. S. Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 255 (1993).
18. Б. Н. Козлов, *Атомная энергия* **12**(3), 238 (1962).
19. А. В. Дракон, А. В. Емельянов, А. В. Еремин и др., *ЖЭТФ* **145**, 943 (2014).
20. А. В. Емельянов, А. В. Еремин, Ю. В. Петрушевич и др., *Письма в ЖЭТФ* **94**, 570 (2011).
21. И. В. Кочетов, А. П. Напартович, Ю. В. Петрушевич, А. Н. Старостин, М. Д. Таран, *ТВТ* **54**, 563 (2016).
22. A. V. Drakon, A. V. Emelianov, A. V. Eremin, E. V. Gurentsov, Yu. V. Petrushevich, A. N. Starostin, M. D. Taran, and V. E. Fortov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 183201 (2012).
23. Б. Е. Гельфанд, О. Е. Попов, С. П. Медведев и др., *ДАН* **330**, 457 (1993).
24. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, т. 10, Физматлит, Москва (2001).
25. В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, И. Л. Иосилевский, Г. В. Симаков, Р. Ф. Трунин, Л. И. Трусков, В. Е. Фортков, *ЖЭТФ* **114**, 1242 (1998).
26. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, V. E. Fortov, A. N. Starostin, V. K. Roerich, V. A. Baturin, and S. V. Ayukov, *Contrib. Plasma Phys.* **53**, 392 (2013).
27. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **58**, 014012 (2016).
28. J. N. Bahcall et al., *Rev. Mod. Phys.* **54**, 767 (1982).
29. C. P. Fenimore and G. W. Jones, *J. Phys. Chem.* **61**, 651 (1957).
30. L. J. Drummond, *Aust. J. Chem.* **21**, 2631 (1968).
31. A. M. Dean and G. B. Kistiakowsky, *J. Chem. Phys.* **54**, 1718 (1970).
32. K. Thielen and P. Roth, *Ber. Bunsenges Phys. Chem.* **87**, 920 (1983).