

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЛАЗМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ САМОСОГЛАСОВАННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ХАРТРИ – ФОКА – СЛЭТЕРА ПРОГРАММЫ THERMOS

М. А. Вронский, Е. А. Карповцев, Е. Ю. Попов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Приводятся формулы для вычисления методом Чепмена – Энскога коэффициентов электропроводности и теплопроводности в неидеальной плазме с использованием самосогласованного потенциала Хартри – Фока – Слэтера, вычисляемого программой THERMOS. Находится приближенное решение уравнения Больцмана для плотности электронной компоненты плазмы, в котором для части, соответствующей электрон-ионным столкновениям берется транспортное сечение, определяемое самосогласованным потенциалом Хартри – Фока – Слэтера. Приводятся результаты расчетов коэффициентов и их сравнение с результатами расчетов, полученных другими методами.

Введение

В настоящей работе рассчитываются транспортные коэффициенты плазмы, которые определяются процессами рассеяния свободных электронов на частично ионизованных атомах и других свободных электронах. Знание кинетических коэффициентов необходимо для проведения газодинамических расчетов по программам неравновесной радиационной газовой динамики при схлопывании лайнера Z-пинча электрофизической установки ЭМИР, а также для расчета генерации и переноса рентгеновского излучения в отсек термоядерной мишени.

В работе в качестве примеров расчетов приводятся коэффициенты электронной теплопроводности и проводимости для W (задачи по схлопыванию лайнера Z-пинча) и Be (задачи по сжатию, термоядерному воспламенению и горению термоядерной мишени).

Общая методика вычисления кинетических коэффициентов с помощью приближения Чепмена – Энскога описана в работе [3, 5]. В данной работе мы сосредоточиваемся на вычислении коэффициентов электро- и теплопроводности. Задача состоит в нахождении решения линейного неоднородного интегрального уравнения с последующим усреднением этого решения с некоторым весом. Мы рассматриваем рассеяние электрона на атомной ячейке с самосогласованным потенциалом Хартри – Фока – Слэтера, рассчитываемым программой THERMOS. Таким образом, мы учитываем неидеальность плазмы и получаем сходящееся выражение для транспортного сечения (в отсутствие экрани-

ровки для кулоновского поля приходится прибегать к расчетам "с логарифмической точностью").

Вычисление поправки для двухкомпонентной плазмы

Рассмотрим систему, состоящую из электронов и одинаковых ионов. Будем считать плазму не слишком сжатой, т. е. будем учитывать только бинарные столкновения и пренебрегать столкновениями большей кратности. Нашей задачей является нахождение коэффициентов теплопроводности и электропроводности, исходя из системы кинетических уравнений Больцмана.

Выпишем уравнения Больцмана для электронной и ионной компонент:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_e}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{e\alpha}}{m_e} \frac{\partial f_e}{\partial v_\alpha} = C_{ee}(f_e, f_e) + C_{ei}(f_e, f_i);$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{i\alpha}}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha} = C_{ie}(f_i, f_e) + C_{ii}(f_i, f_i),$$

где f_e и f_i – функции распределения электронов и ионов; m_e и m_i – массы электронов и ионов; F_e и F_i – действующие на них силы; $C_{\alpha\beta}(f_\alpha, f_\beta) = \iint (f_\alpha(\vec{v}'_\alpha) f_\beta(\vec{v}'_\beta) - f_\alpha(\vec{v}_\alpha) f_\beta(\vec{v}_\beta)) |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta| \times \times \sigma(\vec{n}, |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|) d\vec{n} d\vec{v}_\beta$ – интегралы столкновений.

Как показывают оценки, перекрестный член в уравнении для ионной компоненты мал, поэтому им можно пренебречь.

Задача о нахождении ионной теплопроводности решается аналогично изложенному в предыдущем параграфе. Функцию распределения электронов запишем в виде $f_e = f_{e0}(1 + \Phi)$, где Φ – малая поправка к функции распределения электронов, а функцию распределения ионов полагаем максвелловской. Уравнение Больцмана для электронной компоненты примет вид

$$Df_e \equiv \frac{\partial f_e}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_e}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{e\alpha}}{m_e} \frac{\partial f_e}{\partial v_\alpha} = C_{ee}(f_{e0}, f_{e0}\Phi) + C_{ee}(f_{e0}\Phi, f_{e0}) + C_{ei}(f_{e0}\Phi, f_i).$$

Перепишем это уравнение в виде

$$Df_{e0}(\vec{v}) = f_0(\vec{v}) \int \left(\Phi(\vec{v}') + \Phi(\vec{v}_1') - \Phi(\vec{v}) - \Phi(\vec{v}_1) \right) \times \\ \times f_0(\vec{v}_1) |\vec{v} - \vec{v}_1| \sigma_{ee} d\vec{n} d\vec{v}_1 + \\ + f_0(\vec{v}) \int \left(\Phi(\vec{v}') - \Phi(\vec{v}) \right) f_i(\vec{v}_i) |\vec{v} - \vec{v}_i| \sigma_{ei} d\vec{n} d\vec{v}_i.$$

Электрон-ионный интеграл столкновений значительно упрощается, если считать скорость ионной компоненты постоянной и функцию распределения равной $f_i(\vec{v}_i) = n_i \delta(\vec{v}_i)$, где n_i – пространственная концентрация ионов. Мы принимаем такое приближение, исходя из того, что средние скорости ионов значительно меньше скоростей электронов. В этом случае электрон-ионный интеграл столкновений становится равным

$$\int (\Phi(v\vec{n}) - \Phi(\vec{v})) v \sigma(\vec{n}, v) d\vec{n}.$$

Если нарушающий равновесие фактор – малая векторная величина, то левая часть уравнения Больцмана будет линейным функционалом от этой возмущающей величины. Поэтому решение будем искать в виде

$$\Phi(\vec{v}) = (\vec{x}, \vec{v}) g(v),$$

где \vec{x} – возмущающий фактор.

После подстановки этой функции в интеграл электрон-ионных столкновений он примет вид

$$(\vec{x}, \vec{v}) v g(v) \int_0^\pi 2\pi (\cos \theta - 1) \sin \theta \sigma(\theta, v) d\theta = \\ = -2\pi (\vec{x}, \vec{v}) v g(v) \sigma_{tr}(v),$$

где $\sigma_{tr}(v) = \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sin \theta \sigma(\theta, v) d\theta$ – транспортное сечение.

Для вычисления коэффициента электропроводности необходимо решить уравнение Больцмана

$$\frac{(\vec{E}, \vec{v})}{T} = K(\Phi_1) - 2\pi (\vec{E}, \vec{v}) \sigma_{tr} n_i g_1(v),$$

где $K(\Phi)$ – интеграл ee -столкновений; $\Phi_1 = (\vec{E}, \vec{v}) g_1(v)$.

Учитывая линейность уравнения и произвольность \vec{E} , получим

$$\frac{\vec{v}}{T} = K(\vec{v} g_1(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr} n_i g_1(v) v. \quad (1)$$

Решив это уравнение относительно g_1 , подставим решение в интеграл

$$\vec{j} = -\int \vec{v} (\vec{E}, \vec{v}) g_1(v) f_0(v) d\vec{v} = -4\pi \vec{E} \int_0^\infty \frac{v^2}{3} g_1(v) f_0(v) v^2 dv.$$

Таким образом, проводимость выразится в виде

$$\Sigma = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g_1(v) f_0(v) dv.$$

Вычисление коэффициента теплопроводности

При наличии градиента температуры в плазме создается ненулевое электрическое поле, поэтому при вычислении коэффициента электронной теплопроводности приходится учитывать два возмущающих фактора. Уравнение Больцмана в этом случае записывается в виде

$$\frac{f_0}{T} (e\vec{E} + \nabla\mu, \vec{v}) + \frac{f_0 (mv^2/2 - \mu)}{T^2} (\nabla T, \vec{v}) = St(\delta f).$$

Здесь μ – химический потенциал. Вычисление коэффициента теплопроводности нужно проводить в два этапа. Сначала вычислим термоэлектрический коэффициент. Для этого положим $e\vec{E} = \nabla\mu$.

Решая уравнение Больцмана

$$\frac{mv^2/2 - \mu}{T^2} (\nabla T, \vec{v}) K(\Phi_2) - 2\pi (\nabla T, \vec{v}) \sigma_{tr}(v) n_i g_2(v) v$$

или учитывая произвольность градиента температуры

$$\frac{mv^2/2 - \mu}{T^2} \vec{v} = K(\vec{v} g_2(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr}(v) n_i g_2(v) v, \quad (2)$$

находим термоэлектрический коэффициент α из уравнения

$$\vec{j} = -\int \vec{v} (\nabla T, \vec{v}) g_2(v) f_0(v) d\vec{v} = -\alpha \Sigma \nabla T,$$

или

$$\alpha \Sigma = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g_2(v) f_0(v) dv.$$

Далее, включая разность температур и электрическое поле так, чтобы $\vec{E} + \nabla\mu/e = \alpha \nabla T$, и решая уравнение Больцмана

$$\left(\alpha + \frac{mv^2/2 - \mu}{T} \right) \frac{(\nabla T, \vec{v})}{T} = K(\Phi_3) - 2\pi (\nabla T, \vec{v}) \sigma_{tr} n_i g_3(v) v,$$

или

$$\left(\alpha + \frac{mv^2/2 - \mu}{T} \right) \frac{\vec{v}}{T} = K(\vec{v} g_3(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr} n_i g_3(v) v, \quad (3)$$

вычислим коэффициент теплопроводности из соотношения

$$\bar{q} = -\chi \nabla T = \int \bar{v} \frac{v^2}{2} (\nabla T, \bar{v}) g_3(v) f_0(v) d\bar{v},$$

откуда следует, что

$$\chi = -\frac{2\pi}{3} \int v^6 g_3(v) f_0(v) dv.$$

Из сравнения уравнений (1), (2) и (3) видно, что $g_3 = \alpha g_1 + g_2$. Для упрощения вычислений вместо уравнения (2) будем решать уравнение

$$\frac{mv^2}{2T^2} \bar{v} = K(vh_2) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i h_2(v)v, \quad (4)$$

а затем выразим $g_2 = h_2 - \frac{\mu}{T} g_1$.

Таким образом, нужно решить два уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{v}}{T} &= K(\bar{v}g(v)) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i g(v)v; \\ \frac{v^2 \bar{v}}{2T^2} &= K(\bar{v}h(v)) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i h(v)v \end{aligned} \quad (5)$$

и вычислить интегралы

$$S_1 = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g(v) f_0(v) dv;$$

$$S_2 = -\frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 g(v) f_0(v) dv;$$

$$S_3 = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 h(v) f_0(v) dv;$$

$$\frac{4\pi}{T} \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+4} dv = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}g(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} g(v) \sigma_{tr}(v) dv;$$

$$\frac{2\pi}{T^2} \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+6} dv = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}h(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} h(v) \sigma_{tr}(v) dv.$$

Воспользуемся формулой

$$\int_0^\infty v^a f_0(v) dv = \frac{n_e 2^{a/2} T^{a/2-1} \Gamma((a+1)/2)}{\pi^{3/2}}.$$

Левые части уравнений перепишутся в виде

$$\frac{n_e 2^{m+2} T^m}{\pi^{1/2}} \Gamma(m+5/2) = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}g(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} g(v) \sigma_{tr}(v) dv;$$

$$\frac{n_e 2^{m+2} T^m}{\pi^{1/2}} \Gamma(m+7/2) = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}h(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} h(v) \sigma_{tr}(v) dv.$$

Если подставить

$$g(v) = \sum_{i=0}^k \frac{A_i \pi^{3/2}}{n_e 2^i T^{i+1}} v^{2i}, \quad h(v) = \sum_{i=0}^k \frac{B_i \pi^{3/2}}{n_e 2^i T^{i+1}} v^{2i},$$

то получим линейные уравнения относительно A_i, B_i

$$\Gamma(m+5/2) = \sum_{j=1}^k c_{mj} A_j, \quad \Gamma(m+7/2) = \sum_{j=1}^k c_{mj} B_j,$$

где

$$c_{mj} = \left(\frac{\pi^2}{n_e^2 2^{m+j+2} T^{m+j+1}} \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}v^{2j})) v^{2m} d\bar{v} - \frac{\pi^4}{Z_0 n_e 2^{m+j-1} T^{m+j+1}} \int_0^\infty v^{2m+2j+5} \sigma_{tr} f_0(v) dv \right). \quad (6)$$

$$S_4 = -\frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 h(v) f_0(v) dv.$$

Коэффициенты проводимости, термоэлектричества и теплопроводности находятся из уравнений

$$\Sigma = S_1; \quad \alpha \Sigma = S_3 + \frac{\mu}{T} S_1;$$

$$\chi = S_4 + \left(\alpha - \frac{\mu}{T} \right) S_2 = S_4 + S_2 S_3 / S_4.$$

Приближение функций полиномами

В стандартном методе Чепмена – Энскога искомая функция и правая часть уравнения Больцмана разлагаются в ряд по системе ортогональных полиномов, после чего выводится бесконечная система линейных алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов этого разложения. При численном расчете мы обрываем систему на конечном числе членов. Поэтому эквивалентный способ заключается в том, чтобы искать решение в виде многочлена с неизвестными коэффициентами соответствующей степени.

Проинтегрируем оба уравнения (5), домноженные на $f_0 \bar{v} v^{2m}$, получим

Решая две системы уравнений для $m = 0, \dots, k$, найдем соответствующие приближения для $g(v)$ и $h(v)$. Для вычисления кинетических коэффициентов необходимо вычислить значения четырех интегралов. Величины S_i ($i = 1 \dots 4$) выражаются через A_j , B_j следующим образом:

$$S_1 = -\frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^k A_j \Gamma(j+5/2); \quad S_2 = -\frac{4\pi T}{3} \sum_{j=1}^k A_j \Gamma(j+7/2);$$

$$S_3 = \frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^k B_j \Gamma(j+5/2); \quad S_4 = -\frac{4\pi T}{3} \sum_{j=1}^k B_j \Gamma(j+7/2).$$

Матрица C , введенная в соотношение (6), представляет собой разность двух частей, соответствующих ee и ei взаимодействиям. Можно преобразовать ei член

$$\frac{\pi^4}{Z_0 n_e 2^{m+j-1} T^{m+j+1}} \int_0^\infty v^{2m+2j+5} \sigma_{tr}(v) f_0(v) dv = -\frac{2^{3/2} \pi^{5/2} T^{1/2}}{Z_0} \int_0^\infty x^{m+j+2} \sigma_{tr}(xT) e^{-x} dx$$

где σ_{tr} – транспортное сечение; $\sigma_{tr}(E) = \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta$; $\sigma(\theta)$ – сечение рассеяния электрона на ионе, вы-

числяемое программой THERMOS, исходя из самосогласованного потенциала Хартри – Фока – Слэтера. Вычисление электрон-электронной части матрицы C более сложно.

Сечение упругого рассеяния электрона на электроне выражается формулой Мотта

$$\sigma(\theta, v) = \frac{1}{v^4} \left(\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} - \frac{\cos(v^{-1} \log \operatorname{tg}^2(\theta/2))}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right).$$

Минимальный угол рассеяния электрона на электроне при интегрировании определяется по формуле

$$\theta_{\min} = \frac{2}{av_e} \max\left(1, \frac{1}{v_e}\right),$$

где $a = \left(4\pi \langle Z^2 + Z \rangle n_i / T\right)^{-1/2}$ – дебаевский радиус; v_e – тепловая скорость электронов.

Для вычисления ee члена проведем ряд громоздких выкладок. Сначала рассмотрим векторную функцию $\vec{g}(\vec{x}) = \vec{x}x^{2k}$ и преобразуем выражение

$$\vec{g}(\vec{z}/2 + a\vec{x}) + \vec{g}(\vec{z}/2 - a\vec{x}) - \vec{g}(\vec{z}/2 + a\vec{y}) - \vec{g}(\vec{z}/2 - a\vec{y}),$$

где a – положительное число; \vec{x} , \vec{y} – единичные и \vec{z} – произвольные векторы. Сумма первых двух членов есть

$$\vec{z} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ – четно}}} C_k^j (a(\vec{x}, \vec{z}))^j (a^2 + z^2/4)^{k-j} + 2a\vec{x} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ – нечетно}}} C_k^j (a(\vec{x}, \vec{z}))^j (a^2 + z^2/4)^{k-j}.$$

Обозначим последнее выражение через $\vec{R}_k \equiv \vec{R}_k(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, a)$. Введем также обозначение

$$J_{mk} = \int \langle \vec{v}, K(\vec{v}v^{2k}) \rangle v^{2m} f_0(v) d\vec{v},$$

где

$$K(\vec{v}v^{2k}) = \int f_0(v_1) d\vec{v}_1 \int \vec{R}_k \left(\vec{n}, \vec{n}_{\vec{v}_1 - \vec{v}}; \frac{|\vec{v}_1 - \vec{v}|}{2}; \vec{v}_1 + \vec{v} \right) |\vec{v}_1 - \vec{v}| \sigma_{ee} \left(\left(\vec{n}, \vec{n}_{\vec{v}_1 - \vec{v}} \right), |\vec{v}_1 - \vec{v}| \right) d\vec{n}.$$

Если в интеграле J_{mk} сделать замену $\vec{u} = \vec{v}_1 - \vec{v}$, $\vec{w} = \vec{v}_1 + \vec{v}$ (с якобианом 1/8), а также заметить, что для распределения Максвелла

$$f_0(v_1) f_0(v) = f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}),$$

то он переписывается в виде

$$J_{mk} = \frac{1}{2^{m+4}} \iint f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) d\vec{u} d\vec{w} \left((\vec{w} - \vec{u}) |\vec{w} - \vec{u}|^{2m}, \int \vec{R}_k(\vec{n}, \vec{n}_{\vec{u}}; u/2; \vec{w}) \right) u \sigma_{ee}(\vec{n}, u) d\vec{n}.$$

Для вычисления интеграла по сфере введем на ней систему координат так, чтобы

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix}, \quad \vec{w} = \begin{pmatrix} w \sin \chi \\ 0 \\ w \cos \chi \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$

В формулу, определяющую \vec{R}_k , надо подставить

$$\vec{x} = \vec{n}; \quad \vec{y} = (0, 0, 1); \quad \vec{z} = \vec{w}; \quad a = u/2; \\ (\vec{x}, \vec{z}) = w(\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi); \quad (\vec{y}, \vec{z}) = w \cos \chi.$$

Рассматриваемый интеграл по сфере равен

$$\begin{aligned} \vec{I} = \vec{w} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} C_k^j u^{j+1} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k} \times \\ \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left((\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi)^j - (\cos \chi)^j \right) \sigma_{ee}(\cos \theta, u) \sin \theta d\theta d\phi + \\ + \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} C_k^j u^{j+2} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k} \times \\ \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \left((\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi)^j - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (\cos \chi)^j \right) \sigma_{ee}(\cos \theta, u) \sin \theta d\theta d\phi. \end{aligned}$$

Его вторая координата зануляется. Введем для натуральных α, β обозначения

$$T_\alpha(u) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, u) \left((\cos \theta)^\alpha - 1 \right) \sin \theta d\theta; \quad Q_{\alpha\beta}(u) = \int_0^\pi \sigma(\theta, u) (\cos \theta)^\alpha (\sin \theta)^{\beta+1} d\theta; \\ J_\alpha = \int_0^{2\pi} (\cos \phi)^\alpha d\phi = 2\pi \frac{(\alpha-1)!!}{\alpha!!} \times \begin{cases} 1, & \alpha - \text{четно}; \\ 0, & \alpha - \text{нечетно}. \end{cases}$$

Кроме того, для сечения Мотта $\sigma(\theta, a)$ написанные выше интегралы расходятся при некоторых значениях α и β .

В этих случаях интегрирование ведется не от нуля, а от $\theta = \theta_{\min}$. Введем еще одно обозначение

$$P_{kj}(u, w) = C_k^j u^{j+1} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k}.$$

С использованием введенных обозначений скалярное произведение $(\vec{u} - \vec{w}, \vec{I})$ выразится суммой

$$\begin{aligned} - \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} w(u - w \cos \chi) P_{kj}(u, w) \left(T_j(u) \cos^j \chi + \sum_{\alpha=0}^{j-1} C_j^\alpha J_{j-\alpha} Q_{\alpha, j-\alpha}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j-\alpha} \chi \right) - \\ - \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} u^2 P_{kj}(u, w) \left(T_{j+1}(u) \cos^j \chi + \sum_{\alpha=0}^{j-1} C_j^\alpha J_{j-\alpha} Q_{\alpha+1, j-\alpha}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j-\alpha} \chi \right) + \\ + \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} uw P_{kj}(u, w) \left(T_{j+1}(u) \cos^{j+1} \chi + \sum_{\alpha=0}^j C_{j+1}^\alpha J_{j+1-\alpha} Q_{\alpha, j-\alpha+1}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j+1-\alpha} \chi \right), \end{aligned}$$

которую обозначим через $f_{km}(u, w, \cos \chi)$. Тогда

$$\begin{aligned} J_{mk} = \frac{1}{2^{2m+4}} \iint f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) (u^2 + w^2 - 2uw \cos \chi)^m f_{km}(u, w, \cos \chi) d\vec{u} d\vec{w} = \\ = \frac{8\pi^2}{2^{2m+4}} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) u^2 w^2 (u^2 + w^2 - 2uw \cos \chi)^m f_{km}(u, w, \cos \chi) dudw \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

После перехода к безразмерным переменным $x = u/\sqrt{2T}, y = w/\sqrt{2T}$ получим

$$\begin{aligned}
J_{mk} &= \frac{8\pi^2}{2^{2m+4}} \frac{n_e^2}{(2\pi T)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^\pi e^{-x^2/2} e^{-y^2/2} x^2 y^2 \times \\
&\times \left(x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m (2T)^{m+k+9/2} f_{km}(x, y, \cos \chi) dx dy \sin \chi d\chi = \\
&= \frac{n_e^2 2^{k+1/2} (T)^{m+k+3/2}}{\pi} \tilde{J}_{mk},
\end{aligned}$$

где

$$\tilde{J}_{mk} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^\pi e^{-x^2/2} e^{-y^2/2} x^2 y^2 \left(x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m f_{km}(x, y, \cos \chi) dx dy \sin \chi d\chi.$$

Для вычисления \tilde{J}_{mk} разложим степени

$$\left(x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m = \sum_{\gamma=0}^m \sum_{\delta=0}^{m-\gamma} C_m^\gamma C_{m-\gamma}^\delta (-2)^{m-\gamma-\delta} \chi x^{m+\gamma-\delta} y^{m+\delta-\gamma}; \quad P_{kj}(x, y) = \sum_{\beta=0}^{k-j} C_k^j C_{k-j}^\beta 2^{j-2k} x^{1+j+2\beta} y^{2k-2\beta-j}.$$

Отметим также, что

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty y^a e^{-y^2/2} dy &= \int_0^\infty (2z)^{(a-1)/2} e^{-z} dz = 2^{(a-1)/2} \Gamma((a+1)/2); \\
S(a, b) &= \int_0^\pi \cos^a \chi \sin^{b+1} \chi = \int_{-1}^1 x^a (1-x^2)^{b/2} dx = \\
&= \begin{cases} 0 & \text{при нечетном } a; \\ \int_0^1 z^{(a-1)/2} (1-z)^{b/2} dz = B\left(\frac{a+1}{2}, \frac{b}{2}+1\right) & \text{при четном } a. \end{cases}
\end{aligned}$$

Введем для $a > -1$ и натуральных i, j обозначения

$$\tau(a, j) = \int_0^\infty x^a T_j(\sqrt{2mTx}) e^{-x^2/2} dx; \quad q(a, i, j) = \int_0^\infty x^a Q_{i,j}(\sqrt{2mTx}) e^{-x^2/2} dx.$$

С использованием этих величин можно записать

$$\tilde{J}_{mk} = -F_1 + F_2 - F_3 + F_4 - F_5 + F_6 - F_7 + F_8,$$

где каждая из величин F представляет собой многократную сумму, например,

$$\begin{aligned}
F_1 &= \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ - четно}}} \sum_{\beta=0}^{k-j} \sum_{\gamma=0}^m \sum_{\delta=0}^{m-j} C_k^j C_{k-j}^\beta 2^{j-2k} C_m^\gamma C_{m-\gamma}^\delta (-2)^{m-\gamma-\delta} \times \\
&\times 2^{2+m+\delta-\gamma+2k-2\beta-j} \Gamma\left(\frac{4+m+\delta-\gamma+2k-2\beta-j}{2}\right) \times \\
&\times S(j+m-\gamma-\delta; 0) \tau(4+m+\gamma-\delta+j+2\beta; j).
\end{aligned}$$

Несмотря на громоздкость полученного выражения, оно хорошо подходит для численных расчетов величины \tilde{J}_{mk} . Через величину \tilde{J}_{mk} ее часть матрицы S выразится следующим образом

$$\frac{\pi T^{1/2}}{2^{m+3/2}} \tilde{J}_{mk}.$$

Полное выражение

$$c_{mk} = \frac{\pi T^{1/2}}{2^{m+3/2}} \tilde{J}_{mk} - \frac{2^{3/2} \pi^{5/2} T^{1/2}}{Z_0} \int_0^\infty x^{m+j+2} \sigma_{tr}(xT) e^{-x} dx.$$

Лоренцева плазма

Плазма, в которой ee столкновениями можно пренебречь по сравнению с ei столкновениями, называется лоренцевой. В случае лоренцевой плазмы интегральный оператор K можно считать равным нулю. Получившееся

уравнение Больцмана можно решать двумя разными способами. Первый – просто найти неизвестные функции g , h по формулам

$$g(v) = -(2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i)^{-1}; \quad h(v) = -\frac{v}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i}.$$

В этом случае коэффициенты S_i выражаются так:

$$S_1 = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 \frac{1}{2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0}{3\pi^{3/2} T^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (8)$$

$$S_2 = \frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 \frac{1}{2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0 T^{1/2}}{3\pi^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^2}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (9)$$

$$S_3 = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^5 \frac{1}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = -\frac{2^{1/2} Z_0}{3\pi^{3/2} T^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x^2}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (10)$$

$$S_4 = \frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 \frac{v}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0 T^{1/2}}{3\pi^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^3}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx. \quad (11)$$

Второй путь – решать полученное неинтегральное уравнение как интегральное, считая, что в матрице C электрон-электронная часть зануляется. Эти подходы дадут разные результаты, отличие будет тем сильнее, чем хуже σ_{tr}^{-1} приближается полиномами.

Вместо экранированного потенциала можно взять кулоновский (с зарядом ядра Z_0 средней степени ионизации). В этом случае интеграл для транспортного сечения расходится [3], и его необходимо обрезать по углу, определяемому по дебаевскому радиусу. В выражения для S_i нужно подставить

$$\sigma_{tr}(E) = \frac{Z_0 L}{2E^2},$$

где

$$L = \ln \left(\min \left(\frac{\sqrt{2T}}{Z_0}, 1 \right) \frac{T}{\sqrt{2\pi n_i (Z_0 + Z_0^2)}} \right).$$

В этом случае

$$S_1 = \frac{4\sqrt{2}T^{3/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_2 = \frac{16\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_3 = -\frac{16\sqrt{2}T^{3/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_4 = \frac{80\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}.$$

Отсюда получаем, что

$$\Sigma = S_1, \quad \chi = \frac{16\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}.$$

Отметим, что все формулы с кулоновскими логарифмами применимы лишь в случае $L \gg 1$.

Результаты расчетов

В таблицах приведены результаты расчетов электропроводности Σ и теплопроводности χ для различных веществ при различных плотностях и температурах. В колонке "С учетом ee " приводятся результаты расчетов с учетом неидеальности за счет рассеивания на самосогласованном потенциале Хартри – Фока, вычисляемом программой THERMOS с учетом ee -взаимодействия. В колонке "Лоренц-I" приводятся результаты без учета ee -взаимодействия. В колонке "Лоренц-II" приводятся результаты расчетов кинетических коэффициентов по формулам (8)–(11). В колонке "Кулон без ee " приводятся значения кинетических коэффициентов для кулоновского поля с обрезанием (кулоновскими логарифмами). В колонке "Кулон с ee " приводятся значения коэффициентов с учетом ee -столкновений.

Таблица 1

Значения кинетических коэффициентов при различных степенях аппроксимирующих полиномов для H, $T = 1$ кэВ, $\rho = 1$ г/см³

Степень	Σ, χ	С учетом ee	Лоренц-I	Лоренц-II	Кулон без ee	Кулон с ee
2	Σ	52,761	80,661	81,889	63,726	40,02
	χ	1686,744	2736,473	11589,198	9368,029	1019,067
3	Σ	50,434	81,833	81,889	63,726	38,407
	χ	7075,336	11239,603	11589,198	9368,029	6193,406
4	Σ	51,509	81,878	81,889	63,726	39,283
	χ	7184,746	11569,115	11589,198	9368,029	6334,059
5	Σ	51,912	81,885	81,889	63,726	39,559
	χ	7254,13	11584,247	11589,198	9368,029	6411,43

Таблица 2

Значения кинетических коэффициентов при различных степенях аппроксимирующих полиномов для Na, $T = 1$ кэВ, $\rho = 1$ г/см³

Степень	Σ, χ	С учетом ee	Лоренц-I	Лоренц-II	Кулон без ee	Кулон с ee
2	Σ	1,362	1,367	4,165	7,439	6,693
	χ	12,439	12,468	247,635	1093,678	150,452
5	Σ	3,493	3,593	4,165	7,439	6,958
	χ	196,728	200,37	247,635	1093,678	1066,585
6	Σ	3,871	4,003	4,165	7,439	6,957
	χ	198,006	203,488	247,635	1093,678	1066,775
7	Σ	3,88	4,009	4,165	7,439	6,956
	χ	227,032	229,422	247,635	1093,678	1066,645
8	Σ	3,947	4,069	4,165	7,439	6,958
	χ	245,165	246,533	247,635	1093,678	1066,525
9	Σ	4,025	4,146	4,165	7,439	6,958
	χ	245,189	246,75	247,635	1093,678	1066,463

Таблица 3

Значения кинетических коэффициентов для W при различных температурах и плотностях (степень аппроксимирующего полинома 5)

T	ρ		С учетом ee	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без ee	Кулон с ee
10^{-2}	10^{-3}	Σ	4,96e-03	4,98e-03	5,03e-03	-1,12e-03	-1,13e-03
		χ	6,84e-03	7,07e-03	7,24e-03	-1,66e-03	-1,66e-03
10^{-1}	10^{-3}	Σ	4,15e-02	4,20e-02	4,20e-02	3,45e-01	3,05e-01
		χ	5,77e-01	5,801e-01	5,803e-01	5,081	4,841
1	10^{-3}	Σ	7,14e-01	7,23e-01	7,23e-01	9,32e-01	9,15e-01
		χ	1,01e+01	1,015e+01	1,016e+01	1,370e+02	1,360e+02
10^{-2}	10^{-2}	Σ	1,57e-02	1,579e-02	1,585e-02	-8,259e-04	-8,259e-04
		χ	1,66e-02	1,662e-02	1,680e-02	-1,214e-03	-1,213e-03
10^{-1}	10^{-2}	Σ	5,49e-02	5,545e-02	5,561e-02	-1,35e-01	-1,39e-01
		χ	7,43e-01	7,468e-01	7,535e-01	-1,986	-2,006
1	10^{-2}	Σ	8,49e-01	8,59e-01	8,59e-01	1,346	1,319
		χ	1,19e+02	1,20e+02	1,20e+02	1,979e+02	1,965e+02
10^{-2}	10^{-1}	Σ	7,83e-01	7,834e-02	8,24e-02	-6,509e-04	-6,509e-04
		χ	5,54e-02	5,54e-02	5,95e-02	-9,569e-04	-9,563e-04
10^{-1}	10^{-1}	Σ	6,48e-02	6,495e-02	6,756e-02	-5,65e-02	-5,68e-02
		χ	1,111	1,115	1,133	-8,307e-01	-8,314e-01

T	ρ		С учетом ee	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без ee	Кулон с ee
1	10^{-1}	Σ	1,035	1,045	1,045	2,398	2,337
		χ	1,44e+02	1,448e+02	1,448e+02	3,52e+02	3,49e+02
10^{-2}	1	Σ	4,70e-01	4,70e-01	4,71e-01	-5,37e-04	-5,37e-04
		χ	2,81e-01	2,81e-01	2,83e-01	-7,89e-04	-7,89e-04
10^{-1}	1	Σ	1,547e-01	1,547e-01	1,56e-01	-3,57e-02	-3,57e-02
		χ	2,182	2,182	2,216	-5,25e-01	-5,24e-01
1	1	Σ	1,309	1,318	1,318	1,093e+01	1,016e+01
		χ	1,804e+02	1,810e+02	1,810e+02	1,60e+03	1,56e+03
10^{-2}	10	Σ	1,457	1,457	1,456	-4,57e-04	-4,57e-04
		χ	1,155	1,155	1,157	-6,72e-04	-6,71e-04
10^{-1}	10	Σ	5,30e-01	5,30e-01	5,37e-01	-2,61e-02	-2,61e-02
		χ	5,49	5,49	5,63	-3,83e-01	-3,83e-01
1	10	Σ	1,487	1,490	1,500	-4,27	-4,32
		χ	1,08e+02	1,08e+02	1,31e+02	-6,28e+02	-6,29e+02

Замечание к табл. 3. Нефизические (отрицательные) значения проводимостей, вычисленные по спитцеровским формулам, приведены для того, чтобы показать, что использование кулоновских логарифмов теряет область своей применимости, тогда как использование самосогласованного потенциала не приводит к нефизическим результатам.

Таблица 4

Значения кинетических коэффициентов для Be при различных температурах и плотностях (степень аппроксимирующего полинома 5)

T	ρ		С учетом ee	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без ee	Кулон с ee
0,5	10^{-2}	Σ	3,423	4,328	4,342	3,836	3,143
		χ	2,70e+02	3,011e+02	3,043e+02	2,819e+02	2,559e+02
0,5	10^{-1}	Σ	2,6	2,94	3,61	4,92	4,04
		χ	1,78e+02	1,82e+02	2,81e+02	3,62e+02	3,28e+02
0,5	1	Σ	5,51	6,51	6,51	6,88	5,632
		χ	4,16e+02	4,58e+02	4,60e+02	5,063e+02	4,57e+02
0,5	10	Σ	7,308	8,3546	8,3550	1,14e+01	9,262
		χ	5,46e+02	5,89e+02	5,89e+02	8,42e+02	7,55e+02
0,5	10^2	Σ	1,059e+01	1,15e+01	1,15e+01	3,277e+01	2,50e+01
		χ	7,69e+02	8,054e+02	8,054e+02	2,40e+03	2,07e+03
1	1	Σ	1,23e+01	1,48e+01	1,52e+01	1,57e+01	1,29e+01
		χ	8,43e+02	9,7e+02	1,29e+03	2,31e+03	2,09e+03

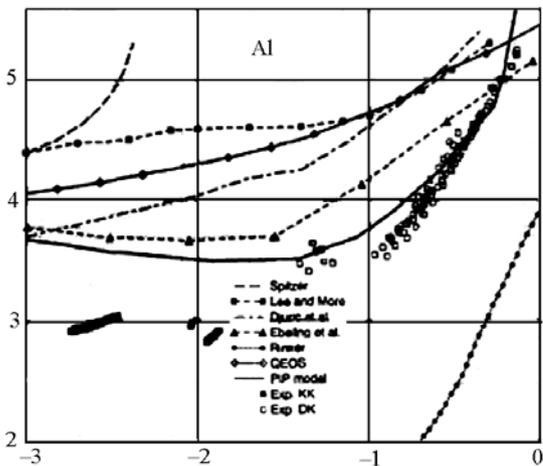


Рис. 1. Зависимость коэффициента электропроводности от плотности при $T = 10000$ К. Теоретические и экспериментальные данные [11]

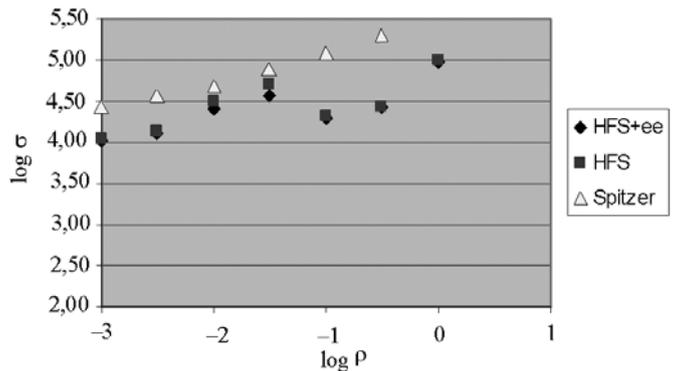


Рис. 2. Зависимость коэффициента электропроводности Al при $T = 10000$ К от плотности. Использован самосогласованный потенциал Хартри – Фока – Слэтера

На рис. 1, 2 приведены экспериментальные и теоретические кривые зависимости проводимости от плотности. Эксперимент показывает немонотонную зависимость коэффициента проводимости. На рис. 2 эта немонотонность хорошо видна. Большинство же теоретических моделей предсказывают монотонную зависимость, что находится в противоречии с экспериментом.

Обсуждение результатов

Из полученных результатов следует вывод, что влияние потенциала на кинетические коэффициенты плазмы не так очевидно, как это может показаться на первый взгляд. Простой вывод, что экранировка потенциала приводит к уменьшению сечения, а следовательно, к увеличению транспортных коэффициентов плазмы по сравнению с незэкранированным потенциалом, оказывается несостоятельным. При некоторых значениях параметров плазмы наблюдается противоположный эффект. Выполненные расчеты позволяют сделать следующие выводы:

1. При учете рассеяния электронов на самосогласованном потенциале Хартри – Фока – Слэтера, кинетические коэффициенты плазмы заметно отличаются от соответствующих результатов, полученных для чисто кулоновской плазмы в работах Спитцера [6], Брагинского [5] и многих других работах (см. ссылки на литературу в работе [10]).

2. Эти результаты согласуются с данными, полученными в работе [9], в которой для вычисления транспортных коэффициентов также использовались потенциалы Хартри – Фока – Слэтера, а для расчета кинетических коэффициентов использовалось простое приближение времени релаксации. К сожалению, в этом случае нельзя корректно учесть вклад ee -рассеяния, которое дает существенный вклад для ионов с малыми Z .

3. Выполненные расчеты кинетических коэффициентов с реальными потенциалами и их сравнение с соответствующими результатами для кулоновских потенциалов показывают, что одного учета дебаевского экранирования недостаточно для правильного расчета транспортных коэффициентов. Чисто дебаевские потенциалы использовались для вычисления транспорт-

ных коэффициентов плазмы Калиткиным [7] и, как показано в его докторской диссертации, позволяют сильно упростить процедуру Чепмена – Энскога по сравнению с нашим случаем произвольных потенциалов. Этот подход, по-видимому, имеет свою, достаточно узкую область применимости для разреженной плазмы с небольшими значениями Z , которую можно определить при проведении более массовых расчетов.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Физматлит, 2001.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001.
3. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2001.
4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.-СПб.: Физматлит-Невский-Диалект-Лаборатория Базовых Знаний, 2001.
5. Брагинский С. И. Явления переноса в плазме // Сборник "Вопросы теории плазмы" / Под ред. М. А. Леонтовича. Вып. 1. М.: Атомиздат, 1963. С. 183–272.
6. Спитцер Л. Физика полностью ионизованного газа. М.: ИИЛ, 1957.
7. Калиткин Н., Кузьмина Л., Рогов В. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. Препринт. М.: ИПМ, 1972.
8. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит. 2000.
9. Rinker G. Systematic calculations of plasma transport coefficients for the Periodic Table // Phys. Rev. A. Vol. 37, № 4. P. 1284–1297.
10. Eppelrein E., Haines M. Plasma transport coefficients in a magnetic field by direct numerical solution of the Fokker-Planck equation // Phys. Fluids. 1986. Vol. 29, № 4. P. 1029–1041.
11. DeSilva A. W., Katsouros J. D. Phys. Rev. 1998. Vol. E 57. P. 5945.

Статья поступила в редакцию 03.09.2008.