

УДК 533.9.15

СПОНТАННАЯ НАМАГНИЧЕННОСТЬ ПЛАЗМЫ КВАНТОВОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

A. B. Кулаков, A. A. Румянцев

В плотной низкотемпературной плазме эффекты перекрытия электронных оболочек оказываются существенными еще до стадии вырождения. В работе показано, что многоцентровые квантовые интегралы перекрытия волновых функций электронов понижают энергию системы. При этом орбитальные моменты частиц, а, следовательно и магнитные моменты, оказываются сопротивленными. Необходимые условия могут реализоваться в лабораторной и космической плазме.

Введение

Проблема спонтанной генерации магнитных полей в плазме является одной из центральных в физике. Продвижение в решении этой проблемы зависит от перспективы той или иной теоретической интерпретации магнитных явлений в плазме — космической и лабораторной. Разделения в исследованиях в этих двух сферах имеют преходящий характер и основаны по существу лишь на различии граничных условий, причем это относится к наиболее характерным для плазмы магнитным явлениям. Поэтому в качестве литературной основы изложения ограничимся ссылкой на обзорную монографию [1].

Классическая неустойчивость волнового типа — вот что образует основу идеи генерации магнитных полей движениями проводящей жидкости. Посредством динамо — механизма происходит либо усиление (часто недостаточно быстро) затравочного поля, либо переработывание одной компоненты поля в другую, например торoidalной в полоидальную во вращающемся шаре. Действие такого механизма связано с реализацией специальных условий, а именно дифференциальное вращение, турбулентность с отличной от нуля спиральностью, неоднородная конвекция, которые приводят к формированию полей глобальных масштабов. Однако нередко наблюдаются локальные поля с относительно малыми линейными размерами, но с напряженностью, значительно превосходящей напряженность общего поля. Это поля в пятнах на Солнце и магнитных звездах, факельных образованиях в плазме, облучаемой интенсивным светом, и т. д.

В плазме, приближающейся к неидеальной, расстояния между частицами сравнимы с кулоновской длиной $\tau \sim T^{-1}$, где T — температура в энергетической шкале, причем здесь и ниже использованы атомные единицы. Если длина волны де Броиля $\lambda < r$, то каждый из электронов движется по орбите, центром которой является тот или иной ион. В этом случае существует обмен иного типа — так называемый сверхобмен [2, 3]. Электронные орбиты последовательно перекрываются между собой, так что в обмен включаются электроны, разделенные расстоянием $R \gg r$. Обменные силы при этом определяются интегралами перекрытия волновых функций, которые оказываются относительно медленно изменяющимися функциями межцентровых расстояний R . В представлении рождения (уничтожения) частиц также оказываются функцией этих расстояний [3]. Результирующий эффект — возникновение сил дальнего порядка.

1. Суперобмен в ионизованном газе

В почти невырожденной и близкой к идеальной системе частиц с кулоновскими силами квантовые поправки на взаимодействие между электронами относительно малы. Например, парные обменные поправки [2] имеют порядок $(\lambda/r)^2$, где λ — де-бройлевская длина волны частицы с тепловой энергией, $r=n^{-1/3}$ — среднее расстояние между ними при концентрации n . Соответствующие обменные силы обусловлены перекрытием волновых функций пары ближайших друг к другу электронов и оказываются не зависящими от того, выбраны ли в качестве базиса волновые функции свободных частиц или электронные волновые функции соседних ионов, принадлежащие непрерывному спектру. Волновая функция системы N атомов антисимметризована относительно перестановок электронов, так что интегралы перекрытия связывают друг с другом не только соседние электроны, но и более удаленные частицы, пока обмен не окажется подавленным экранировкой заряда. Это означает, что эффективно в обмене участвует nr^3 электронов (r — радиус Дебая). Как показывает расчет, проведенный ниже, энергия притяжения каждого электрона и иона вследствие обменных эффектов увеличивается по модулю на величину $r_D^{-1} = \kappa$, что существенно превышает эффект парного обмена между электронами, принадлежащих лишь соседним центрам.

Использованы волновые функции в виде сферических волн, центрированных на каждом из ионов. Такие функции или их некоторые суперионизации типа функций Иоста оказались наиболее адекватными при описании свойств неидеальной плазмы [4]. Электронные состояния мы будем характеризовать волновыми функциями непрерывного спектра с определенными значениями энергии, момента импульса и его проекции на ось квантования, т. е. функциями $\Psi_s(r, \theta, \alpha)$, где s — совокупность квантовых чисел (klm) . Их использование позволяет выявить еще одну важную особенность, связанную с действием обменных сил: возможность спонтанной ориентации орбитальных моментов электронов.

Интегралы перекрытия в выражении для энергии ионов, взаимодействующих посредством электронного обмена, понижают последнюю. Как раз в случае состояний непрерывного спектра обменные межцентровые интегралы спадают с расстоянием R между центрами относительно слабо — степенным образом. Понижение энергии оказывается тем значительнее, чем ближе друг к другу проекции орбитальных моментов взаимодействующих электронов на некоторую фиксированную ось квантования. Это следствие квазиортогонального поведения угловых частей интегралов перекрытия. Орбитальные магнитные моменты электронов оказываются сонаправленными. Минимальной по размерам областью намагниченности (аналогичной доменам) является при этом сфера Дебая. Фиксация направления квантования определяется внешними факторами, например общим, но слабым (затравочным) магнитным полем.

2. Обменная теория возмущений

При рассмотрении сил, действующих между атомами или ионами, обычно предполагается, что часть электронов из их общего числа принадлежит первому атому (иону), часть — второму и т. д. Соответственно и волновая функция системы в нулевом приближении записывается как простое произведение волновых функций изолированных атомов. В случае водородной плазмы, рассмотрением которой мы здесь и ограничимся, можно принять, что каждая пара электрон—ион образует атом водорода в непрерывном спектре энергетических состояний. Тогда указанное произведение есть

$$\Phi = \Psi_{s'}(r') \Psi_{s''}(r'') \dots \chi(\xi),$$

где индекс s' отмечает совокупность чисел (klm) для атома с номером i , а расстояние электрона r' отсчитано от ядра того же номера; функции $\chi(\xi)$ описывают спиновые состояния частиц.

В соответствии с принципом Паули вектор состояния должен быть антисимметризован относительно перестановок электронов: $\Psi = A\Phi$, где A — опера-

тор антисимметризации. Теория возмущений, учитывающая взаимодействие атомов, должна строиться таким образом, чтобы свойства перестановочной симметрии были учтены в любом порядке по возмущению. Если исходить из базиса функций с требуемыми свойствами симметрии, то такая теория автоматически учитывает обменные вклады в энергию системы частиц, поэтому она называется обменной теорией возмущений. Последовательное рассмотрение поправок к энергии (и волновой функции) первого и второго порядков с учетом обмена имеется в работе автора [5]; обзор современного состояния теории в целом имеется в монографии [6].

Все варианты обменной теории возмущений приводят в первом приближении к одному и тому же выражению для энергии взаимодействия данного атома с любыми окружающими его атомами

$$E^{(1)} = (\Phi | \hat{V}_1 | \Psi) (\Phi | \Psi)^{-1}, \quad (1)$$

здесь \hat{V}_1 — оператор возмущения системы атомов, соответствующий исходному распределению электронов по центрам, такому, что несимметризованный вектор состояния есть Φ . Если применить формулу (1) к паре взаимодействующих атомов водорода, находящихся в основном состоянии, то (1) приводит к хорошо известной формуле Гайтлера—Лондона.

Воспользуемся далее борновским приближением, привлекая в качестве базиса невозмущенные волновые функции квазиклассического типа [7]

$$\Psi_s = \chi_{k,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \chi_{k,l} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_e(r)\right),$$

δ_e — медленно (логарифмически) изменяющаяся с расстоянием фаза. В приближении самосогласованного поля, используемого в теории плазмы, потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром представляет собой экранированный потенциал вида

$$V = r^{-1} \exp(-\alpha r),$$

здесь и далее используются атомные единицы. В исследуемом случае непрерывного спектра мы также применим соотношение (1). Прямые интегральные вклады (без учета перекрытий) содержат при этом в силу условий нормировки дельта-функции, определяемые волновыми числами. При рассмотрении обменных вкладов выделим некоторый объем, ограниченный сферой радиуса $r_1 \gg r$, содержащий N частиц (результат практически не зависит от способа фиксации объема). Учтем лишь парные перестановки электронов, принадлежащих центрам, расположенным на расстоянии друг от друга. Число их равняется

$$\frac{1}{2} N \Delta N, \quad \Delta N = 4\pi n R^2 \Delta R.$$

Используя (1), получим следующее уравнение для искомой поправки к энергии взаимодействия комплекса электрон—ион с его окружением:

$$\begin{aligned} E_k^{(1)} \left\{ \delta(k_1 - k) \delta(k_2 - k) + \frac{1}{2} g n N \int_0^{r_1} J_1(R) J_2(R) d^3 R \right\} = \\ = \Delta V_{k,k} \delta(k_2 - k) + \frac{1}{2} g n N \int_0^{r_1} \Delta \tilde{V}_{k,k} J_2(R) d^3 R, \end{aligned}$$

здесь

$$V_{k,k} = (\Psi_{s_1}(r) | V | \Psi_{s_1}(r)), \quad J_i = (\Psi_{s_i}(r') | \Psi_{s_i}(r)), \quad \tilde{V}_{k,k} = (\Psi_{s_1}(r') | V | \Psi_{s_1}(r))$$

— матричные элементы для прямого и обменного взаимодействия; индекс $i = 1, 2$; $r' = |\mathbf{r} - \mathbf{R}|$; $r = |\mathbf{r}|$; $g = \pm 1$ в зависимости от четности перестановки. Величина $\Delta V = V_{k,k} - V_{k \neq k}$ — разность, отделяющая при последующем интегрировании по волновым числам сингулярную часть.

Наиболее важным в контексте работы представляется случай, когда обменный вклад в нормированном множителе, который содержится в левой сто-

роне (2), превышает прямой вклад, равный единице после интегрирования по волновым числам. Это означает по существу, что при любой схеме Юнга спиновой части волнового вектора последняя сокращается, так что спиновая ориентация не влияет ни на величину поправки к энергии атомов, ни на знак этой поправки.

3. Ориентация электронных орбитальных моментов

Обратимся к расчету величин, входящих в соотношение (2). Наиболее существенными оказываются при этом межъядерные расстояния $R \sim \propto^{-1}$, и если считать выполненным условие квазиклассического приближения $kR \gg 1$, то обменные интегралы вычисляются в аналитическом виде.

Расчет проводится поэтапно. Сначала интегрируем по угловым переменным радиуса-вектора R , соединяющего каждую из пар ядер. При этом следует учесть, что в интервалы перекрытия вносит вклад дисковая область вблизи середины указанного вектора толщины $\lambda = 2\pi/k$. Полярные и азимутальные углы, определяющие направления радиусов-векторов электронов r, r' , отсчитанных от разных центров, отличаются друг от друга в этой области на малые величины $(kR)^{-1}$, что показано в Приложении.

Интегралы по угловым переменным не малы лишь при равенстве квантовых чисел $l=l', m=m'$ каждой пары электронов, участвующих в обмене. После первого этапа интегрирования уравнение (2) сохраняет свою форму, но с заменой

$$J_i \rightarrow I = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (\chi_{k_1}(r') | \gamma_k | (r)).$$

Интеграл

$$V_{k_1 k} = 2 \ln \frac{\propto^2 + (k_1 + k)^2}{\propto^2 + (k_1 - k)^2}$$

не содержит сингулярной части, поэтому прямой вклад ΔV , по определению, равен нулю. На втором этапе при вычислении интегралов по радиальным координатам электронов используем переход к эллиптическим переменным. В результате получим

$$I(R) = \frac{2\sqrt{\pi}}{kR} \exp(-\propto R) \sin \propto R \delta(k_1 - k). \quad (3)$$

Дельта-функции устраняются при интегрировании по волновым числам, и поправка к энергии оказывается равной

$$E^{(1)} = - \left(\frac{2\pi}{k} \right)^2 g n N \int_0^{r_1} \sin^2 kR \exp(-2\propto R) R^{-1} dR \times \\ \times \left[1 + 8\pi^2 k^{-2} g n N \int_0^{r_1} \sin^2 kR \exp(-2\propto R) dR \right]^{-1} \approx -4\propto L, \quad (4)$$

где $L = \ln k/\propto$. При $r_1 = r$, $N = 2$ обменный вклад в нормировочный интеграл имеет порядок $(\pi\lambda/r)^2$, и тот же порядок имеет обменная поправка к энергии [2]. Строго говоря, приведенный расчет применим лишь при $N \gg 1$, например начиная с $N = 10$ или $r_1 > 2r$. Тогда обменный вклад в знаменателе 4 превысит единицу, если межатомное расстояние удовлетворяет неравенству

$$r < 10\lambda < r_d, \quad (5)$$

т. е. в случае достаточно плотной, но относительно «холодной» плазмы. Практически оба последних неравенства реализуются лишь в качестве слабых. Тогда расстояние

$$r \leq [(1000e^2/T) a^2]^{1/3},$$

a — боровский радиус, причем это и последующие неравенства записаны в обычных единицах измерения.

Итак, при охлаждении (регулярном или случайному) плазмы, когда ее параметры таковы, что выполнены неравенства (5), «включается» взаимодействие, обусловленное суперобменом. Его энергия в расчете на один комплекс электрон-ион

$$E^{(1)} = -4e^2 \times L,$$

т. е. отрицательна и не зависит от числа N . Минимальная ячейка — домен имеет линейные размеры порядка дебаевского радиуса. Максимальные же размеры, как можно полагать, определяются граничными условиями.

4. Спонтанная намагниченность

Тепловое движение создает электронные магнитные моменты

$$\mu = er\delta c^{-1}, \quad \delta = (T/m)^{1/2}.$$

В результате обменной ориентации возникнет магнитное поле с напряженностью $H = 4\pi n\mu$. Энергия магнитного поля должна быть при этом меньше выигрыша энергии за счет обменных сил рассмотренного типа. Отсюда следует неравенство

$$W_M = H^2/8\pi \ll ne^2 \times = W_0, \quad (6)$$

которое всегда выполняется в плазме, далекой от релятивизма.

Время, необходимое для ориентации магнитных моментов, можно оценить исходя из соотношения неопределенности для энергии. При этом $\tau \sim \pi\hbar/\mu H$. Оно должно быть меньше обратной частоты столкновений для электронов. Это требование несколько изменяет последнее неравенство

$$W_M < \min(W_0, W_1), \quad W_1 = \frac{\hbar W_0}{T} \left(\frac{ne^2}{m} \right)^{1/2}, \quad (7)$$

что, однако, практически не влияет на оценки по порядку величины.

Генерация (и относительно быстрое исчезновение) магнитных полей на поверхности Солнца до сих пор представляет собой загадку (см. Введение). Продолжимость солнечной плазмы высока, линейные размеры, например, солнечных пятен имеют порядок $l = 10$ тыс. км, так что условия вмороженности заданы выполнены. Это условие должно приводить к характерным времененным масштабам изменения полей, на много порядков превышающим наблюдаемые. В то же время $l \sim 10^{-2} R_0$, где R_0 — радиус Солнца, т. е. $l \ll R_0$, что представляет трудность для МГД механизма генерации, действующего в глобальных масштабах за счет гипотетического дифференциального вращения слоев Солнца [1]. По-видимому, быстрота генерации полей обусловлена квантовым процессом рассмотренного типа. На глубине порядка ~ 10 тыс. км (под фотосферой) концентрация $n = 10^{20} \div 10^{21}$ см $^{-3}$, $T = 10^{-11}$ эрг, так что $er \sim 1$ (указанной плотности достаточно для рассматриваемого эффекта). Заметим, что в условиях равновесия с индексом политропы три последнее равенство выполняется по всей глубине, где этот индекс сохраняется. Далее получаем $\mu = 10^{-18}$ CgS, $H = 4 \cdot 10^3$ Гс, $r = 10^{-7}$ см, квантовое время $\tau = 10^{-12}$ с. Распространению обменных сил сопоставим скорость $u \sim 10^6$ см·с $^{-1}$. Характерное макроскопическое время генерации поля $3 \cdot 10^4$ с значительно меньше времени диффузии полей и согласуется с наблюдениями. Запишем поправки к энергии в виде $E^{(1)} = -be^2 \times$, $b = 4L$, изменения свободной энергии комплекса и давления, энтропии соответственно равны

$$\Delta F = \frac{1}{3} E^{(1)}, \quad \Delta p = \frac{2}{3} n E^{(1)}, \quad \Delta s = \frac{E^{(1)}}{6T}.$$

Отсюда поправка к показателю адиабаты вещества $\Delta \gamma = b/24\pi nr_0^3$ положительна и может быть сравнимой с единицей. Но это означает, что существенно нарушается условие сверхадиабатичности; именно

$$\gamma < d \ln p / d \ln \rho < \gamma + \Delta \gamma.$$

Конвенция при этом подавлена и среда охлаждается, что также соответствует наблюдениям в солнечных пятнах.

Аналогичная физическая ситуация, приводящая к спонтанной генерации магнитных полей, может иметь место и в лабораторной плазме. Например, при сжатии ее излучением $n = 10^{25} \text{ см}^{-3}$, $T = 10^{-9} \text{ эрг}$; тогда, согласно (6), $H = 10^6 \div 10^7 \text{ Гс}$. Такие поля трудно объяснить другими механизмами [8]. Поэтому приведенные оценки демонстрируют действенность рассмотренного нового механизма, хотя и не исчерпывают в полной мере соответствующих физических явлений.

Приложение

Угловые интегралы перекрытия

Сферические функции при больших значениях их индексов можно определить следующей приближенной формулой [7]:

$$Y_{lm} = \frac{1}{\pi \sin \vartheta^{1/2}} \sin \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \vartheta + \frac{m\pi}{4} + \frac{\pi}{4} \right] \exp(im\varphi). \quad (\text{П. 1})$$

Пусть R — радиус-вектор, проведенный от центра 1 к центру 2; ϑ_0 — угол, составленный этим вектором с осью квантования z ; ϑ, ϑ' — полярные углы, определяющие положения электронных радиусов-векторов r, r' , отсчитанных от указанных центров. При этом имеет место соотношение

$$r \cos \vartheta - r' \cos \vartheta' = R \cos \vartheta_0. \quad (\text{П. 2})$$

Как уже отмечено, основной вклад при интегрировании радиальных частей вносит область $r \approx r' = R/2$, так что при $kR \gg 1$ отклонения $\delta r \sim \delta r' \sim k^{-1}$. Соответствующие изменения углов $\delta(\vartheta - \vartheta') = (kR \operatorname{tg} \vartheta)^{-1}$, аналогично по модулю при $\vartheta < 1$ $\delta(\varphi - \varphi') \sim 1/kR$.

Следовательно, угловые суперпозиции типа

$$l\vartheta - l'\vartheta' = \Delta l\vartheta + 0(l\vartheta) \sim \Delta l\vartheta = (l - l')\vartheta, \quad kR > 1.$$

Тогда интеграл по углам $\int Y' Y^* d\Omega$ непосредственно вычисляется и отличен от нуля при $\Delta l = 0, \Delta m = m - m' = 0$. Поправки имеют порядок l/kR . В обратном предельном случае $l > kR$ основной вклад в угловые интегралы вносят слагаемые вида

$$J = \int_0^1 \exp[i\Delta l(\vartheta + \alpha\vartheta^{-1})] d\vartheta, \quad \alpha = l/\Delta l kR.$$

Эти интегралы вычисляются по методу перевала и оказываются экспоненциально малыми

$$J \sim \alpha^{1/4} \exp(-2\Delta l/\alpha^{1/2}) \ll 1,$$

если величина Δl по модулю существенно превышает единицу.

Литература

- [1] Паркер Е. Космические магнитные поля. М.: Мир, 1982, т. 2. 480 с.
- [2] Веденов А. А. В сб.: Вопросы теории плазмы / Под ред. Леонтиевича М. А. М.: Атомиздат, 1963, в. 1, С. 273—285.
- [3] Уайт Р. Кварковая теория магнетизма. М.: Мир, 1985. 303 с.
- [4] Кремп Д., Крефт В., Эбелинг В. Теория связанных состояний и ионного равновесия в плазме и твердом теле. М.: Мир, 1979. 202 с.
- [5] Румянцев А. А. ЖЭТФ, 1973, т. 65, № 9, с. 926—931.
- [6] Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982, с. 134—160.
- [7] Ландау Л. Д., Лишниц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1978.
- [8] Лебо Й. Г. Препринт ФИАН № 64. М., 1982. 60 с.