

УДК 539.038

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ И БАРОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

В.И. Григорьев, В.С. Ростовский

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Исследуется перераспределение зарядов внутри атомных ячеек вещества под действием бароэлектрического поля при учете гравитационного и электрического сжатия небесных тел.

Перераспределение электрических зарядов, вызываемое неоднородностью внутренних напряжений в проводнике, рассматривалось во многих работах, результаты которых вошли в монографию [1], посвященную описанию бароэлектрического эффекта и его гео- и астрофизических проявлений. Физическая причина бароэлектрического перераспределения зарядов заключается в том, что в неоднородно напряженном проводнике энергетически выгодны перемещения электронов на макроскопические расстояния – их переходы из областей больших в области меньших внутренних напряжений. В результате таких переходов даже в равновесных проводниках возникает электростатическое поле, которое можно назвать “безваттным”, поскольку для его поддержания не требуется затрат энергии.

Для вычисления напряженности такого бароэлектрического поля было предложено несколько методов, приводящих к близким результатам. Один из них базируется на наиболее общем условии термодинамического равновесия – условии постоянства электрохимического потенциала $\text{grad } \mu_e = 0$, которое, однако, удобнее заменить эквивалентным ему условием

$$\text{grad} \left\{ W + \frac{E^2}{8\pi} \right\} = 0, \quad (1)$$

в котором W обозначает разность между плотностью энергии в проводнике при наличии и при отсутствии внутренних напряжений, а вектор E – макроскопическую, т.е. усредненную по физически бесконечно малым объемам, напряженность бароэлектрического поля. Величина W , которую можно назвать плотностью “избыточной” энергии, зависит, вообще говоря, от всех локальных параметров, определяющих состояние вещества, из которых преимущественный интерес для нас представляют те, что описывают внутренние напряжения. В наиболее простом варианте, когда рассматривается жидкий проводник, вместо тензора напряжений достаточно рассматривать единственную скалярную величину – давление p , и на первый план выходит задача о том, какой вид имеет зависимость $W(p)$. Наиболее последовательно эта задача решается в рамках квантовой теории. Однако известные трудности, возникающие при рассмотрении многоэлектронных систем, заставляют использовать некоторые упрощающие предположения. Для решения интересующих нас задач можно ограничиться сравнительно простой моделью: среда рассматривается как со-

вокупность сферически-симметричных атомных ячеек, для расчетов каждой из которых используется метод Хартри–Фока–Слэтера [2]. В рамках этого метода волновая функция электронов в каждой из атомных ячеек записывается в виде детерминанта $\Phi = \text{Det} \|\psi_i\|$, построенного из одноэлектронных функций (детерминант Слэтера), что обеспечивает выполнение требований принципа Паули. Каждая из одноэлектронных функций представляется в виде

$$\psi_i = R_i(r) Y_i(\Theta, \phi) U(s_i),$$

где r, Θ, ϕ – координаты электрона, $i = 1, 2, \dots, Z$ (Z – заряд ядра).

Постановка рассматриваемой далее задачи такова, что потенциальная энергия предполагается сферически-симметричной, поэтому переменные разделяются, а угловая $Y_i(\Theta, \phi)$ и спиновая $U(s_i)$ части имеют стандартный вид, такой же, как и в любой центрально-симметричной задаче. Что же касается радиальной части $R_i(r)$, то, представляя ее в виде $R_i(r) = \chi_i(r)/r$, приходим к уравнению для $\chi_i(r)$, которое, если пользоваться атомными единицами, записывается в виде

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} + 2(V(r) - \varepsilon_i) \right\} \chi_i = 0. \quad (2)$$

Здесь ε_i – энергия электрона,

$$V(r) = \begin{cases} V_e(r) + V_{\text{ex}}(r), & r < r_0, \\ -\frac{1}{r_0}, & r > r_0, \end{cases}$$

где r_0 – точка сшивания, $V(r_0) = -1/r_0$. Подобное сшивание, предложенное в модели Германа–Скиллмана [3], обеспечивает правильную асимптотику потенциальной энергии. После усреднения по термам прямой потенциал электронного облака записывается в виде

$$V_e(r) = \frac{4\pi}{r} \int_0^r x^2 n(x) dx + 4\pi \int_r^b x n(x) dx$$

(где b – радиус атомной ячейки), а усредненный обменный потенциал

$$V_{\text{ex}}(r) = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{1}{3}}. \quad (3)$$

Плотность заряда $n(r)$, входящая в выражения для V_e и V_{ex} , предполагается усредненной по углам,

что соответствует предположению о сферической симметрии в используемой модели.

Первые два члена в левой части уравнения (2) порождаются, как и обычно, оператором кинетической энергии, причем в центробежный потенциал входит орбитальное квантовое число l ; вместе с магнитным квантовым числом оно определяет также и угловую часть волновой функции $Y_l(\Theta, \phi)$.

Потенциальная энергия в (2) описывается тремя членами: $-Z/r$ – потенциальная энергия электрона в кулоновском поле ядра, V_e – потенциальная энергия межэлектронного взаимодействия и V_{ex} – усредненная по импульсам обменная энергия. Представление V_{ex} в форме (3) основывается на приближении невзаимодействующих электронов [2].

Важное место в теории отводится граничным условиям. Они записываются в виде

$$\frac{d}{dr} R_i(r) \Big|_{r=b} = 0. \quad (4)$$

Посредством этих условий учитывается взаимодействие между различными атомными ячейками. Действительно, все ячейки рассматриваются как электронейтральные и сферически-симметричные, они не порождают электростатических полей во внешней области, так что электрического взаимодействия в обсуждаемой модели просто нет, и взаимодействие между соседними ячейками может быть учтено только условием (4).

Вполне очевидно, что положение об электронейтральности атомных ячеек противоречит высказанному выше утверждению, что сама сущность бароэлектрического эффекта связана с переходом электронов из одних областей проводника в другие. Однако количественные оценки показывают, что, например, в центре Земли, где давление максимально и откуда поэтому вытесняется больше всего электронов, лишь одна из $10^{16} \div 10^{17}$ атомных ячеек теряет по одному электрону, так что влияние этого эффекта на интересующую нас объемную плотность энергии пренебрежимо мало.

После того как при помощи уравнений (2) с учетом граничных условий (4) найдены собственные значения энергии \mathcal{E} , нетрудно затем найти и полную энергию $\mathcal{E}(b)$ ячейки и, учитывая связь энергии с давлением:

$$p = -\frac{1}{4\pi b^2} \frac{d\mathcal{E}(b)}{db},$$

найти и плотность "избыточной" энергии:

$$W = \frac{3}{4\pi b^3} \{\mathcal{E}(p) - \mathcal{E}(0)\}.$$

Заметим, что для проверки реалистичности получаемых рассматриваемым методом оценок можно обратиться к оценкам модулей всестороннего сжатия K различных веществ. По определению $K = -V \frac{dp}{dV}$, где V – объем атомной ячейки. Можно убедиться, что K представимо в виде

$$K = \frac{p + W}{dW/dp}. \quad (5)$$

В дальнейшем используется зависимость K от давления, найденная по формуле (5). Качественно результат рассмотрения таков: при давлениях, меньших чем давление Ферми, K остается постоянным, а в области высоких давлений линейно возрастает с ростом p .

После нахождения зависимости $W(p)$ можно переходить к вычислению бароэлектрического поля, если известно распределение давлений. Для небесных тел можно принять самую примитивную модель: рассматривать эти тела как химически и физически однородные холодные шары, вращающиеся как единое целое с постоянной угловой скоростью. В работе [1] детально обсуждается, почему и когда можно удовлетвориться такой на первый взгляд нереалистичной моделью. Основные аргументы при этом таковы: как показывают проведенные оценки, химические неоднородности, порождающие контактные разности потенциалов и термоэлектрические добавки к бароэлектрическим полям, малы по сравнению с последними; что же касается дифференциальных внутренних движений, то мы исключаем их из рассмотрения специально для того, чтобы сосредоточить внимание именно на вкладе бароэлектрического эффекта.

Однако проведенное ранее рассмотрение необходимо дополнить по крайней мере в двух пунктах. Один из них касается учета тех добавок к гидростатическим давлениям, которые появляются из-за поверхностных зарядов. Мы принимаем, что небесное тело (далее оно именуется "планета") в целом электронейтрально, и в результате бароэлектрического вытеснения электронов из его внутренних областей эти области оказываются заряженными положительно, а на поверхности возникает отрицательный заряд; плотность этого поверхностного заряда, как и всегда, определяется скачком напряженности электрического поля.

В рассматриваемой нами простейшей модели планеты напряженность бароэлектрического поля имеет (благодаря сферической симметрии) только радиальную составляющую, величина которой, как следует из (1), равна

$$E(r_c) = \sqrt{8\pi\{W(0) - W(r_c)\}},$$

где r_c – расстояние от центра планеты, так что $W(0)$ – плотность "избыточной" энергии в ее центре.

У поверхности планеты $r_c = R$ гидростатическое давление p_g обращается в нуль. Однако остается "электрическое" давление, обязанное поверхностным зарядам и равное

$$p_e(r_c) = \text{const} = \frac{E^2(R)}{8\pi}, \quad (6)$$

поскольку над поверхностью электронейтральной планеты (напомним, что предполагается сферическая симметрия) электрическое поле отсутствует. Это

постоянное p_e прибавляется к p_g , так что полное давление $p = p_g + p_e$. Именно это полное давление и определяет $W(p)$.

Если известна зависимость $W(p)$, то, используя (1), легко убедиться, что p_e удовлетворяет уравнению

$$p_e = W(p_g(0) + p_e) - W(p_e), \quad (7)$$

решив которое, можно при помощи (6) найти и $E(R)$.

В качестве иллюстрации обратимся к тому феноменологическому варианту (справедливому при $p_0 \ll K$), в котором

$$W(p) = \frac{p^2}{2K}. \quad (8)$$

Подставляя это в (7), находим, что

$$E^2(R) = 4\pi p_0^2 / (K - p_0).$$

Если $p_0 \gg K$, то для W больше подходит другое феноменологическое выражение: $W(p) = 3p/2$, которое получается в модели невзаимодействующих электронов. Это приводит к выражению $E^2(R) = 12\pi p_0$, что в полтора раза больше, чем получалось бы без учета "электрического" давления. Качественный результат очевиден: добавление p_e к p_g приводит к увеличению числа электронов, вытесняемых из недр планеты на ее поверхность, т.е. к некоторому увеличению напряженности электрического поля.

Еще один эффект, не рассматривавшийся ранее, приводит, наоборот, к уменьшению напряженности электрического поля. Имеется в виду эффект микроскопического перераспределения зарядов, т.е. их перераспределения внутри каждой из атомных ячеек. В изложенном выше подходе такая микроскопическая поляризация не учитывалась. В то же время она была основным предметом обсуждения в начале 1960-х гг., когда появился ряд работ, посвященных поляризации проводников под действием гравитационного поля. Из них наибольшую известность получила работа Шиффа и Барнхилла [4]. Даже появился термин "поле Барнхилла-Шиффа". В предельно упрощенном (но сохраняющем физическое существо дела) варианте напряженность этого поля может быть получена из такой оценки: на ядро атома массы M со стороны гравитационного поля, величина напряженности которого равна g , действует сила Mg , компенсирующаяся действием электрической силы, равной по модулю eE , где e - заряд ядра (точнее, атомного остова). Из условия равновесия немедленно получается оценка для величины напряженности электрического поля: $E = Mg/e$.

Многokратно предлагались и более изощренные методы теоретического рассмотрения; в частности, использовалась и так называемая двухжидкостная модель (ионная и электронная жидкости), но результаты, касающиеся оценок для поля Барнхилла-Шиффа, остались такими же, как и при указанном выше примитивном рассмотрении. Критики

нашей теории бароэлектрического эффекта не уловили различия между бароэлектрическим полем и полем Барнхилла-Шиффа, хотя различие это очевидно: последнее обязано микроскопическому перераспределению зарядов внутри каждой из атомных ячеек, а первое - макроскопическому, связанному с перемещением электронов на макроскопические расстояния. Даже сам приведенный выше метод теоретического описания бароэлектрического поля, при котором внутриатомное перераспределение зарядов попросту игнорируется, делает очевидным различие между этими двумя механизмами формирования электрического поля. Бароэлектрическое поле оказывается абсолютно доминирующим, когда перепады давлений порядка давления Ферми. Если же эти перепады малы, в эксперименте может проявляться поле Барнхилла-Шиффа, которое в действительности и было обнаружено.

Однако кроме весьма незначительного эффекта микроскопического перераспределения заряда внутри атомных ячеек под действием гравитационного поля планеты существует еще один поляризационный эффект, который не учитывался нами ранее, но роль которого в формировании электрического поля заметна. Имеется в виду влияние самого бароэлектрического поля на распределение зарядов в атоме, т.е., иначе говоря, электрическая поляризация бароэлектрическим полем.

Оценку этого эффекта можно провести так. Вначале указанным выше способом находим бароэлектрическое поле без учета поляризационных поправок. Затем стандартным образом находим поляризуемость атома (нелинейный эффект Штарка во втором приближении теории возмущений [5]).

В настоящей работе использовались волновые функции возбужденных электронов в поле "замороженного остова" для каждого значения радиуса ячейки. Учитывались волновые функции оболочек до $10s$, $9p$, $8d$, $7f$ и $6g$ включительно. Поляризуемость β отдельного атома вычислялась при учете только одночастичных возбуждений и с усреднением по термам,

$$\beta = 2 \sum_{n'l} \sum_{n'l'} q_{nl} (4l'+2 - q_{n'l'}) \frac{|\langle n'l | r | n'l' \rangle|^2}{\epsilon_{n'l'} - \epsilon_{nl}} \begin{pmatrix} l & l' & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2,$$

где q_{nl} - число электронов на оболочке с соответствующими квантовыми числами, $\begin{pmatrix} l & l' & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ - $3j$ -символ Вигнера.

После нахождения β вычисляется поляризуемость вещества

$$\alpha = \frac{3\beta}{4\pi b^3}$$

и электрическое поле с учетом поляризации

$$E_{\text{pol}} = \frac{E}{\sqrt{1 + 4\pi\alpha}},$$

причем в качестве b можно принять радиус атомной ячейки при нулевом давлении. В результате появле-

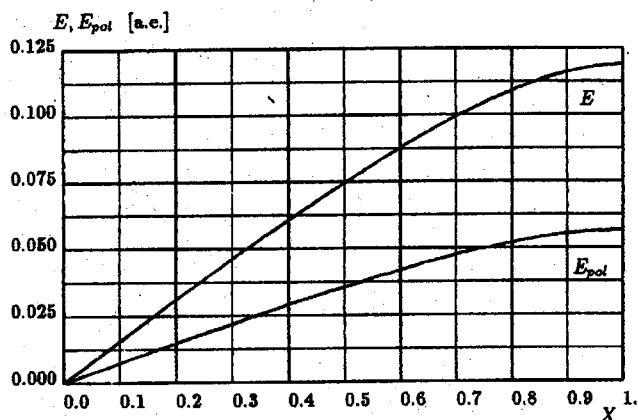


Рис.1. Бароэлектрическое поле в алюминии

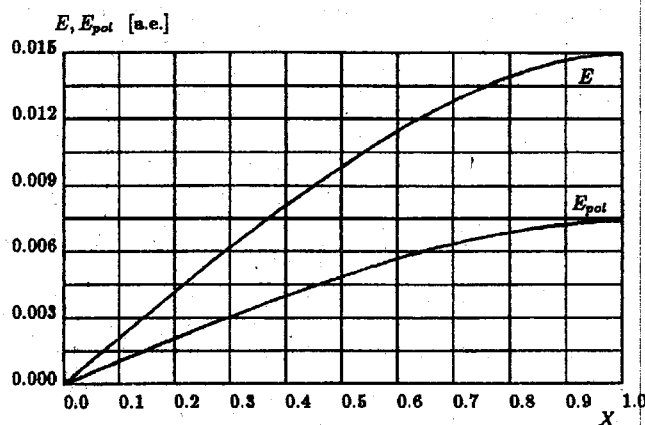


Рис.2. Бароэлектрическое поле в железе

ния дипольных электрических моментов у атомных ячеек невозмущенное бароэлектрическое поле несколько уменьшается. На рис. 1 и 2 показан ход напряженности невозмущенного (верхняя линия) и результирующего (нижняя) поля в зависимости от безразмерного параметра $x = r_c/R$ алюминиевой и железной "планеты" (при таком же давлении в центре, как и у Земли). Поскольку проводимое нами рассмотрение, в частности заведомо огрубленная модель планеты, не позволяет рассчитывать на большее, чем только на оценки напряженности бароэлектрического поля лишь по порядку величины, может показаться, что учет поляризации, равно как и электрического давления, может представлять лишь методический интерес. Это действительно так, если рассматривать планеты Земной группы. Но положение радикально меняется, если иметь в виду планеты-гиганты и тем более звезды. В небесных телах достаточно больших размеров напряженность бароэлектрического поля, возрастая по мере удаления от центра, может на некоторых (критических) расстояниях R_c от него увеличиться на-

столько, что должно будет вызывать уже не поляризацию, а ионизацию атомов (пробой). Оценки для R_c можно получить из соотношения $E(R_c) = e/a_B^2$, где a_B – радиус Бора. По мере приближения r_c к R_c все заметнее становится роль эффектов, приводящих к экранировке бароэлектрического поля, так что на расстояниях от центра, превышающих критические, нужны новые методы для его оценок, что, однако, должно явиться предметом особого рассмотрения.

Литература

1. Григорьев В.И., Григорьева Е.В. Бароэлектрический эффект и электромагнитные поля планет и звезд. М., 1995.
2. Slater J. //Phys.Rev. 12951. 81. P.385.
3. Herman F., Skillman S. Theory of Atomic Calculations. New-Jersey, 1963.
4. Schiff L.I., Barnhill M.V. //Phys.Rev. 1966. 151. P.1067.
5. Соболевман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М., 1977.

Поступила в редакцию
10.07.96

АСТРОНОМИЯ

УДК 523.345 + 524.316

ИОНИЗАЦИЯ ВОДОРОДА В ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНЫХ СЛОЯХ АТМОСФЕР ХОЛОДНЫХ ЗВЕЗД

Е.А.Бруевич, Н.А.Катышева

(ГАИШ)

Вычислен параметр ионизации газа $\frac{N_c}{N_c + n_1}$ для различных значений плотностей и температур газа двумя вероятностными методами решения уравнений стационарности. Проведено сравнение величины, полученной указанными выше методами, с результатами других авторов. Показано, что параметр ионизации довольно сильно зависит от оптической толщины газа, плотности и температуры.

Введение

При анализе спектров и проведении численного моделирования процессов, развивающихся во вне-

шних атмосферах звезд, необходимо знать распределение атома водорода (самого распространенного элемента во Вселенной) по возбужденным уровням и степень его ионизации. Особо актуальным этот