

539.124

ЭЛЕКТРОНЫ И ПОЗИТРОНЫ В ПЛОТНЫХ ГАЗАХ**А. Г. Храпак, И. Т. Якубов****СОДЕРЖАНИЕ**

Введение	45
1. Подвижность электрона в умеренно плотных газах	46
а) Подвижность термализованных электронов (47). б) Скорость дрейфа горячих электронов (49). в) Захват электронов молекулами газа (51). г) О подвижности при больших плотностях (52). д) Аннигиляция медленных позитронов в умеренно плотных инертных газах (53).	
2. Связанные состояния электрона, позитрона и позитрония в плотных газах	55
а) Электронные пузырьки в плотных газах (56). 1) Простейшая модель (57); 2) Приближение самосогласованного поля (58); 3) Основные характеристики пузырьков (59). б) Позитрониевые пузырьки и скорость аннигиляции позитрония (61). 1) Скорость аннигиляции позитрония (62); 2) Скорость аннигиляции позитрония в неидеальном газе (63); 3) Время локализации (64); 4) Энергетический барьер на поверхности среды (65). в) Электронные кластеры в тяжелых инертных газах (66). 1) Кластеры большого радиуса (67); 2) Флуктуоны малого радиуса (69); 3) Корректный учет поляризационного и межатомного взаимодействия. Сравнение с экспериментом (71); 4) Ориентационные кластеры в газе дипольных молекул (73). г) Позитронные кластеры. Критическая точка явления кластеризации (75). 1) Позитронные кластеры и аннигиляция медленных позитронов (76); 2) Критическая точка кластеризации (78).	
3. О некоторых приложениях	79
а) Ионизационный коэффициент Таунсенда (79). б) Коронный разряд в криогенном гелии (81). в) Электропроводность неидеальной слабо ионизованной плазмы (82).	
Цитированная литература	83

ВВЕДЕНИЕ

Обзор посвящен явлениям, возникающим при появлении в плотных газах легких заряженных частиц — электронов и позитронов. Состояние этих частиц в газе с ростом плотности газа претерпевает радикальное изменение. Об этом свидетельствуют наблюдения резкого падения подвижности электронов с ростом плотности газа, экспоненциального увеличения скорости аннигиляции медленных позитронов и другие эксперименты.

Уже при умеренных плотностях и давлениях (при нормальной температуре — это давления в десятки атм) наблюдаются качественные эффекты. С ростом плотности в одних газах приведенная подвижность возрастает, а в других — падает. Это падение предвосхищает яркие явления, вызываемые образованием связанных состояний электронов, позитронов или атомов позитрония со средой. В зависимости от характера взаимо-

действия возникают кластеры, ориентационные кластеры, пузырьки или образования смешанного типа.

В обзоре рассматриваются условия, когда плотность электронов (позитронов) настолько мала, что взаимодействием между ними можно пренебречь. Все основные эффекты обусловлены взаимодействием между легкой заряженной частицей и атомами газа, что связано с большой длиной волны легкой частицы или большим радиусом взаимодействия заряд — нейтрал. В первой главе рассматривается область умеренных плотностей, 10^{20} — 10^{21} см⁻³, где достаточен учет лишь первых плотностных поправок. В гл. 2 обсуждаются эффекты локализации, возникающие при больших плотностях, 10^{21} — 10^{22} см⁻³, когда становится заметным и межатомное взаимодействие. В гл. 3 обсуждаются некоторые приложения.

Если состояние электронов и позитронов в разреженных газах изучено сравнительно хорошо¹⁻³, то интерес к плотным газам сильно повысился лишь в последнее десятилетие. При этом, несмотря на то, что исследовались совершенно различные свойства (например, подвижность электронов и скорость аннигиляции позитронов), обнаруженные аномалии обусловлены родственными явлениями. Одной из целей настоящего обзора и является обсуждение эффектов, общих для всех легких частиц в плотных газах.

Плотные газы представляют собой простейшую реализацию плотной неупорядоченной среды. Задача об электроны в плотной среде неупорядоченных рассеивателей⁴⁻⁶ моделирует целый ряд явлений в различных областях физики, таких, например, как физика неполярных жидкостей⁷, сильно легированных полупроводников^{8, 9}, растворов электролитов⁷, неидеальной плазмы¹⁰. Теоретическое исследование свойств электронов и позитронов в плотных газах во многом опирается на методы, широко используемые в теории конденсированных неупорядоченных систем, развитые в работах^{5, 11, 12}.

1. ПОДВИЖНОСТЬ ЭЛЕКТРОНА В УМЕРЕННО ПЛОТНЫХ ГАЗАХ

Нелинейные эффекты, обусловленные взаимодействием электронов (позитронов) с атомами (молекулами) газа, возникают при таких плотностях, когда сам газ можно считать еще близким к идеальному. Их появление обусловлено либо большим значением длины волны электрона, либо большим радиусом действия потенциала взаимодействия электрон — атом. Поэтому наиболее интересные эффекты следует ожидать в холодных газах и в газах, атомы которых обладают большой поляризуемостью. При этом в полной мере проявляются особенности взаимодействия электронов с атомами и молекулами газа.

При исследовании подвижности инжектированных в газ электронов плотностные эффекты были замечены при плотностях $N = 10^{20}$ — 10^{21} см⁻³. Уже при этих не слишком высоких плотностях взаимодействие электрона с атомами не сводится к ряду последовательных актов парного рассеяния. Поэтому подвижность электронов не совпадает с величиной μ_0 , определяемой формулой Лоренца,

$$\mu_0 = \frac{e}{mv}, \quad v = Nqv; \quad (1.1)$$

здесь v — средняя частота столкновений электрона с атомами, q — сечение рассеяния, v — скорость электрона, $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$, ε — его энергия.

В экспериментах последних лет был обнаружен качественный эффект. В большинстве газов, например в He и H₂, приведенная подвижность μ/μ_0 с ростом N падает. Однако в Ag и CH₄ величина μ/μ_0 , наоборот, возрастает.

Такое поведение μ/μ_0 лишь в последнее время нашло свое объяснение в особенностях взаимодействия электронов с атомами этих групп газов.

Аналогично этому плотностные эффекты должны влиять на состояние позитрона (и позитрония) в плотных газах. В последнем параграфе этого раздела обсуждаются измерения скорости аннигиляции позитронов в газах.

а) Подвижность термализованных электронов

Большая часть измерений проведена прямым «времяпролетным» методом¹³. В этих работах измеряется время дрейфа между двумя электродами электронов, инжектированных в газ. Поскольку расстояние между электродами известно, то тем самым измеряется скорость дрейфа W , $W = \mu F$, где F — напряженность электрического поля. На рис. 1 представлены результаты измерений в He, H_2 ^{14, 15}, Ar ¹⁶, CH_4 ¹⁷ в слабых полях, т. е. в условиях, когда электроны термализованы. Обсудим причины разного хода $W/W_0(N)$ в этих газах.

Поскольку плотность электронов мала, они взаимодействуют лишь с атомами газа. При умеренных плотностях газа межатомным взаимодействием еще можно пренебречь. Поэтому электрон находится в поле $u(r)$ хаотически расположенных рассеивателей,⁴

$$u(r) = \sum_j V(r - R_j), \quad (1.2)$$

здесь $V(r)$ — потенциал взаимодействия электрона с атомом, R_j — координата j -го атома. Для медленных электронов $V(r)$ определяется длиной рассеяния L и поляризуемостью атома α ^{18a}. Рассмотрим сначала случай, когда поляризуемость мала.

Если поля соседних атомов не перекрываются, $N|L|^3 \ll 1$, то $V(r)$ может быть представлен в виде псевдопотенциала Ферми

$$V(r) = \frac{2\pi\hbar^2 L}{m} \delta(r). \quad (1.3)$$

При малых плотностях электрон сталкивается с атомами с частотой $\nu = Nqv$, где $q = 4\pi L^2$ — сечение рассеяния. Когда длина волны электрона $\lambda = \hbar/\sqrt{2m\varepsilon}$ становится сопоставимой с длиной пробега $(qN)^{-1}$, последовательные акты рассеяния уже не являются независимыми. Эффективная частота столкновений возрастает на интерференционную поправку:

$$\nu_{\text{eff}} = \nu (1 + \lambda q N). \quad (1.4)$$

Этот эффект может оказаться первым плотностным эффектом¹⁹.

Интерференционный эффект уменьшает скорость дрейфа,

$$\frac{W}{W_0} = 1 - \sqrt{\pi} \lambda_\beta q N, \quad (1.5)$$

где $\lambda_\beta = \hbar/\sqrt{2mT}$ — тепловая длина волны. Для атома He $L = 1,2a_0$, для молекулы H_2 $L = 1,6a_0$. При $T = 300$ К и $N = 10^{21}$ см⁻³ получаем $W/W_0 - 1 \approx 0,1$, что соответствует наблюдаемой на опыте величине (рис. 1).

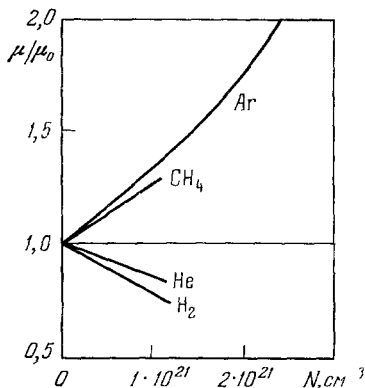


Рис. 1. Зависимость приведенной скорости дрейфа термализованных электронов от плотности в различных газах ($T = 300$ К).

Если сечение $q(\varepsilon)$ от энергии зависит очень слабо, то (1.5) может быть переписана в виде $W/W_0 = 1 - \eta NT^{-1/2}$, где η является константой для данного газа. Шварц^{18б} провел анализ результатов измерений в гелии: при изменении плотности и температуры величина η действительно оставалась константой. Температура менялась в широких пределах — от 4,2 до 300 К.

Рассмотрим теперь ситуацию в газе с большой поляризуемостью α . В этом случае потенциал $V(\mathbf{r})$ нельзя считать короткодействующим (1.3). Дальнодействующая поляризационная компонента потенциала $V(\mathbf{r}) = -\alpha e^2/2r^4$ существенна для рассеяния. Представим $V(\mathbf{r})$ в виде суммы короткодействующей компоненты (электростатического и обменного происхождения) и поляризационной:

$$\mathfrak{V}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 L}{m} \delta^2(\mathbf{r}) + \frac{\alpha e^2 \pi^2}{2r_0^4} \delta^2(\mathbf{r}) - \frac{\alpha e^2}{2(r_0^2 + r^2)^2}. \quad (1.6)$$

Величина «радиуса атома» r_0 имеет, очевидно, порядок боровского радиуса a_0 . Потенциал (1.6) применим к медленным электронам с большой длиной волны λ , $\lambda \gg |L|$, $\lambda \gg r_0$, $\lambda^2 \gg \alpha a_0^{-1}$. Амплитуда рассеяния на потенциале (1.6) на угол θ имеет вид^{18а}

$$f = L \left(1 + \frac{\pi\alpha}{2La_0\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \right).$$

Эта теория хорошо согласуется с результатами измерений в разреженных газах.

В плотных газах оказывается важным то, что электрон, наводя дипольные моменты на атомах, индуцирует диполь-дипольное взаимодействие между ними. Сориентированные на электрон диполи взаимно расталкиваются, уменьшая результирующий дипольный момент атома. В итоге в асимптотике потенциала $V(r)$ возникает множитель, зависящий от плотности²⁰:

$$\mathfrak{V}(r) = -\frac{\alpha e^2}{2r^4} \left(1 + \frac{8\pi}{3} \alpha N \right)^{-1}.$$

Этот множитель представляет собой диэлектрическую проницаемость газа. Итак, электрон-атомное взаимодействие в среде описывается потенциалом

$$V(r) = \frac{2\pi\hbar^2 L}{m} \delta(r) + \frac{\alpha e^2 \pi^2}{2r_0^4} \delta(r) - \frac{\alpha e^2}{2(r_0^2 + r^2)^2} \left(1 + \frac{8\pi}{3} \alpha N \right)^{-1}, \quad (1.7)$$

который применим как при умеренных, так и при высоких плотностях²¹. Последнее будет проведено позже, в разделе г). При умеренных плотностях, когда $8\pi\alpha N/3 \ll 1$, амплитуда рассеяния на $V(r)$ (1.7) имеет вид

$$f(N) = L \left(1 + \frac{\pi\alpha}{2La_0\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \right) + \frac{8\pi}{3} \alpha N \cdot \frac{\pi\alpha}{4a_0 r_0}. \quad (1.8)$$

Последний член в (1.8) дает положительную плотностную поправку. Если $L < 0$, то f с ростом N уменьшается, следовательно, W/W_0 возрастает.

Именно такова ситуация в Ag и CH_4 . Для аргона $L = -1,2a_0$, $\alpha = 11,1a_0^3$, $r_0 = 1,2a_0$ (это значение r_0 предложено в²²). При $T = 300$ К и $N = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ получаем уменьшение эффективного сечения примерно на 30%, что и объясняет наблюдаемое увеличение W/W_0 (рис. 1)²¹. Существенно то, что эффект не обязательно должен быть небольшим. Малым параметром является не поправка к амплитуде рассеяния, а величина $8\pi\alpha N/3$.

В работах ²³⁻²⁷ измерялась подвижность в He и H₂ при более низких температурах 20—160 К и плотностях до $6 \cdot 10^{21}$ см⁻³. На рис. 2 представлены результаты работы ²⁶. Во-первых, отметим, что подвижность сравнительно резко падает с ростом N (не обратно пропорционально плотности $\sim N^{-1}$, а скорее как $N^{-3/2}$ или N^{-2}). Во-вторых, μ не зависит от температуры газа *). Это позволяет предложить следующую интерпретацию. В плотной холодной среде электрон обладает «нулевой» энергией $2\pi\hbar^2 LN/m$, которая определяет скорость его поступательного движения (в соответствии, например, с моделью Вигнера — Зейтца ²⁸ (см. также гл. 2, б)). Поэтому, пока $2\pi\hbar^2 LN/m \gg T$, для подвижности в первом приближении имеем $\mu = (e/\hbar) (4\pi LN)^{-3/2} L^{-1}$. К этой величине имеются поправки по параметру $LN^{-1/3}$ подобно тому, как они учитываются в задаче о состоянии атома позитрония в среде ^{29, 30}. Это позволяет интерпретировать результаты, представленные на рис. 2, хотя корректное описание еще не получено.

В работе ²⁴, наряду с обсуждаемой выше зависимостью, была обнаружена ветвь с низкой подвижностью. В связи с ее трактовкой возникла дискуссия ^{24, 26, 31}. Бартельс показал, что эта ветвь связана с наличием в газе примесных ионов, главным образом O₂.

б) Скорость дрейфа горячих электронов

Интересные экспериментальные данные получены в греющих электрических полях, когда средняя энергия электрона превышает температуру газа T . В плотных газах скорость дрейфа W перестает быть функцией лишь F/N . Появляется дополнительная зависимость от плотности $W(F/N, N)$, обнаруженная в целом ряде работ, см. обзор ³².

На рис. 3, а приведены значения W/W_0 в зависимости от F/N при разных плотностях в водороде и аргоне. Они получены времяпролетным методом в работах ^{14, 16}. В обоих случаях максимальные отклонения от единицы наблюдаются при малых полях, когда электроны термализованы. В результате нагрева электронов величины W/W_0 стремятся к единице. Из общих соображений легко понять, что всякие эффекты, обусловленные неидеальностью при больших энергиях должны исчезать. Однако наряду с простыми монотонными зависимостями $W(F/N, N)$ наблюдаются и более сложные. На рис. 3, б представлены зависимости, измеренные в метане ¹⁷ и этане ³³. Обсуждение второй из них отложим до следующего раздела, что же касается немонотонности зависимости W/W_0 в CH₄, она обусловлена одновременным проявлением эффектов, наблюдаемых в Ar и H₂ ³⁴.

*) Заметим, что это не означает, что электроны перешли в локализованное состояние. Этот переход при 77 К реализуется при $N = 7 \cdot 10^{21}$ см⁻³ (см. гл. 2, а)). Переход в эксперименте ²⁶ имеет место лишь при $T = 20,3$ К (см. рис. 2).

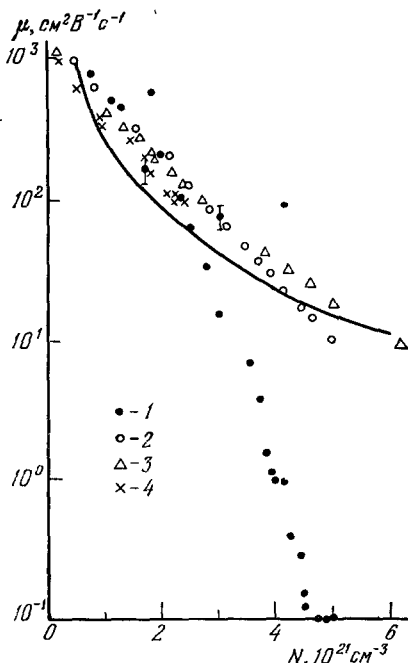


Рис. 2. Подвижность электронов μ в зависимости от плотности гелия ²⁶ при различных температурах:
 T (К) = 20,3 (1), 52,8 (2), 77,3 (3) и 160 (4).

В одноэлектронном приближении скорость дрейфа всегда может быть выражена через эффективную частоту ν_{eff} , $W = eF/m\nu_{\text{eff}}$. Если предполо-

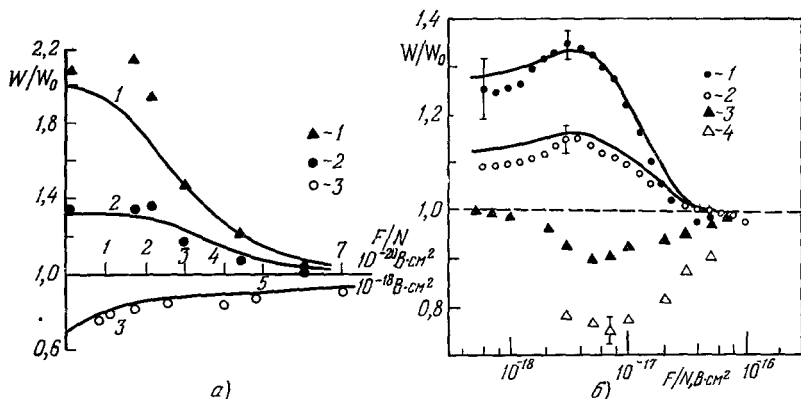


Рис. 3. Приведенная скорость дрейфа электронов в плотных газах в зависимости от F/N ($T = 300$ K).

а) Аргон: 1 — $N = 2,5 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 2 — $1 \cdot 10^{21}$ см⁻³; водород: 3 — $N = 1 \cdot 10^{21}$ см⁻³; б) метан: 1 — $N = 1,1 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 2 — $0,5 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 3 — $1,1 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 4 — $0,4 \cdot 10^{21}$ см⁻³.

жить, что взаимодействие не изменяет закон дисперсии электронов, то усреднение ν_{eff} (ϵ) по энергии ϵ проводится обычным образом ³⁵:

$$W = -\frac{2}{3} \frac{eF}{m} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{\nu_{\text{eff}}(\epsilon)} \frac{\partial f}{\partial \epsilon}. \quad (1.9)$$

Для функции распределения электронов имеем ³⁵

$$f(\epsilon) = f(0) \exp \left[- \int_0^\epsilon \left(T + \frac{2e^2 F^2}{3\delta m \nu_{\text{eff}}} \right)^{-1} d\epsilon \right], \quad (1.10)$$

где δ — доля энергии, теряемая при соударении, $\delta = 2m/M$ — при малых F/N . В сильных полях δ возрастает в результате влияния неупругих процессов ³⁵.

В газе с малой поляризуемостью, когда $q(\epsilon)$ не зависит от ϵ , учтем интерференционный эффект (1.4). Для термализованных электронов W/W_0 соответствует (1.5). Для очень горячих, когда $T \ll 2e^2 F^2 (3m\nu^2)^{-1}$, получаем с помощью (1.10) и (1.9)

$$\frac{W}{W_0} = 1 - 4\Gamma \left(\frac{7}{4} \right) Nq\lambda_\beta \sqrt[4]{\frac{3\delta m \nu_\beta^2 T}{2e^2 F^2}}, \quad (1.11)$$

где $\nu_\beta = Nq \sqrt{2T/M}$. С ростом F/N величина W/W_0 возрастает, поскольку падает средняя длина волны электронов. На рис. 3, а результаты расчета ³⁴ (кривая 3) сопоставлены с экспериментальными данными ¹⁴, полученными в водороде при $T = 300$ K.

Результаты расчета по формуле (1.11) и (1.5) были сопоставлены в ¹⁸⁶ с экспериментальными данными в гелии при $T = 4,2$ K. Рис. 4 позволяет проследить изменения скорости дрейфа электронов от «холодных» до весьма «горячих». При малых F/N подвижность электронов сильно подавлена интерференционным эффектом. Шварц отмечает, что формула (1.5) хорошо описывает это состояние, несмотря на то, что можно было бы ожидать появления в ней более высоких степеней параметра $(\lambda_\beta q N)$.

Лишь при нагреве электронов до энергии $\bar{\epsilon} \approx 0,02$ эВ (рис. 4) они в полном смысле становятся свободными.

На рис. 3, а результаты измерений в аргоне сопоставлены с расчетными данными (кривые 1 и 2), полученными при использовании (1.8), что соответствует случаю высокой поляризуемости³⁴. Величина W/W_0 убывает с ростом F/N по мере увеличения средней энергии электронов. Все большая доля электронов попадает в область энергии, где плотностные поправки малы, т. е. в область энергий, превосходящих энергию рамзауэровского минимума. Очевидно, что конкуренция двух рассмотренных эффектов может дать и немонотонный ход W/W_0 . Такой является ситуация в метане, где оба эффекта оказались важны³⁴. Расчетные кривые, построенные с их учетом, а также с учетом сильного влияния на функцию распределения процессов возбуждения колебаний молекул, хорошо описывают данные эксперимента (см. рис. 3, б).

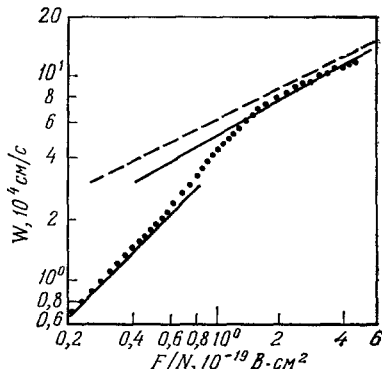


Рис. 4. Экспериментальные значения скорости дрейфа в гелии при $T = 4,2$ К ($N = 0,948 \cdot 10^{21}$ см⁻³)^{18б}.

Штриховая линия — скорость дрейфа W_0 в приближении идеального газа; верхняя сплошная кривая — расчет по формуле (1.11), нижняя — по формуле (1.5).

в) Захват электронов молекулами газа

Рассмотрим дрейф электрона, если он в процессе своего движения может образовывать связанное состояние с молекулами газа. Это предположение было сделано в работе³⁶ и обсуждается в работе³².

Поскольку подвижность отрицательного иона мала, можно считать, что движение электрона осуществляется только в те интервалы времени, когда он свободен. Тогда для приведенного значения подвижности имеем

$$\frac{\mu}{\mu_0} = w_e,$$

где w_e — вероятность того, что электрон свободен. Наиболее вероятно, что связанные состояния являются автоионизационными и возникают при возбуждении электроном вращательных (или колебательных) состояний молекулы.

Будем считать, что, дрейфуя между электродами, электрон много раз переходит из связанного состояния в свободное и наоборот³⁷. В реальных условиях опыта это выполняется с большим запасом. Тогда $w_e(1 - w_e) = n_b/n_f$, где n_b и n_f — плотности свободных и связанных электронов, находящихся в статистическом равновесии. Исходя из этого, авторы работы³⁷ получили

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \frac{1}{1 + N\mathcal{F}}. \quad (1.12)$$

Если электроны термализованы, то \mathcal{F} дается формулой Саха $\mathcal{F} \approx \lambda_{\bar{\epsilon}}^3 \exp(-\epsilon_a/\bar{\epsilon})$, где ϵ_a — энергия возбуждения автоионизационного состояния, $\bar{\epsilon}$ — средняя энергия электронов, в данном случае T . В греющем поле равновесие является лишь относительным, поэтому \mathcal{F} приобретает более сложный вид,

$$\mathcal{F} = \frac{\pi^2 \sqrt{2} \hbar^3}{m^{3/2}} f(\epsilon_a), \quad (1.13)$$

где $f(\epsilon_a)$ — функция распределения электрона по энергии при $\epsilon = \epsilon_a$. Например, для молекул, сечение которых не зависит от энергии, $\mathcal{F} \approx \approx \lambda_{\epsilon}^3 \exp(-\epsilon_a^2/2\epsilon^2)$. Поскольку $f(\epsilon_a)$ максимальна, если средняя энергия ϵ совпадает с ϵ_a , то из (1.12), (1.13) следует, что, независимо от конкретного вида $f(\epsilon)$, μ/μ_0 имеет минимум при $\epsilon = \epsilon_a$. Это позволяет по экспериментальным данным судить о величине ϵ_a . Кроме того, отметим, что если интерференционная поправка определяется малым параметром λqN , то рассматриваемая здесь поправка характеризуется параметром $\lambda^3 N$ (при условии, что $\epsilon \approx \epsilon_a$). Поэтому она может быть более важной при малых ϵ .

Такая ситуация, по-видимому, имеет место в ряде молекулярных газов (в атомарных этот механизм не работает ³²). Минимум μ/μ_0 хорошо выражен в C_2H_6 (см. рис. 3, б); оказывается, что $\epsilon_a \approx 0,08$ эВ. В связи с измерениями ³⁸, проведенными в H_2 при $T = 77$ К, можно также предположить наличие захвата электронов при малых F/N . Измеренные зависимости W/W_0 (F/N) имеют немонотонный ход, детали которого не описываются интерференционной поправкой.

В ³⁷ было отмечено, что реально ситуация может быть более сложной. При больших N величина ϵ_a сама может существенно зависеть от N вследствие сдвига границы непрерывного спектра. При этом может стать важным плотностный параметр $\lambda^2 LN$, определяющий этот сдвиг, обусловленный взаимодействием электронов с атомами газа.

г) О подвижности при больших плотностях

Хотя экспериментальный материал является далеко не исчерпывающим, есть основания полагать, что поведение электронов при умеренных

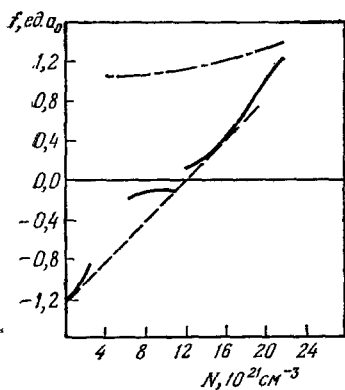


Рис. 5. Зависимость эффективной амплитуды рассеяния электрона на атоме Ag от плотности газа ¹⁶ и жидкости ²².

Штриховая — экспериментальная зависимость ²¹.
Кривая — теоретическая зависимость ²¹.

плотностях предвосхищает явления, возникающие при еще более высоких N . В районе критических плотностей приведенная подвижность μ/μ_0 в He резко падает в результате локализации электронов — их захвата в массивные «пузырьки». Этот эффект подробно обсуждается в разделе а) гл. 2 и проиллюстрирован на рис. 8. Наоборот, в Ag — даже в жидком — электрон остается свободным, обладая высокой подвижностью порядка сотен $cm^2/V \cdot c$.

Обсудим сначала ситуацию в Ag ²¹. На рис. 5 сплошные кривые представляют собой зависимость от плотности амплитуды рассеяния в среде $f(N)$, извлеченную из измерений подвижности в аргоне — в газе ¹⁶ и жидкости ²². Известно, что амплитуда рассеяния в среде может не только получать поправки, как это продемонстрировано в предыдущих разделах. Она может стать радикально отличной и даже поменять знак по отношению к

амплитуде рассеяния на изолированной частице (см., например, ³⁹). Именно так и обстоит дело в аргоне, на что обратил внимание Лекнер в работах, посвященных подвижности электрона в жидкости ^{20, 40}. Обсудим ситуацию наиболее простым образом, исходя из потенциала (1.7)

На рис. 5 штриховой линией показан ход $f(N)$, соответствующий рассеянию на потенциале (1.7). При малых N для $f(N)$ справедливо выра-

жение (1.8). Амплитуда рассеяния уменьшается по абсолютной величине в результате ослабления поляризационной компоненты потенциала. Затем она проходит через нуль и начинает возрастать. При очень больших N она могла бы выйти на значение $L_1 = L - (\pi/4) \alpha/a_0 r_0$, что означало бы рассеяние на неполяризованном атоме. Естественно, что в этом случае преобладает отталкивание.

Реальная ситуация при жидкостных плотностях значительно более сложная. Очень важным становится структура среды. Квадрат амплитуды рассеяния умножается на структурный фактор $S(0)$ ⁴¹,

$$S(0) = 1 + N \int [g(r) - 1] dr = NT\kappa, \quad (1.14)$$

где $g(r)$ — парная функция межатомной корреляции, κ — изотермическая сжимаемость среды. В газе $S(0) \approx 1$, в простых жидкостях в районе тройной точки $S(0)$ порядка нескольких сотых.

Сначала уменьшение $|f(N)|$, а затем и структурного фактора $S(0)$ приводят к сохранению подвижности на высоком уровне. Электрон в жидком аргоне остается свободным.

В противоположность аргону приведенная подвижность μ/μ_0 в гелии падает с ростом плотности газа N в соответствии с формулой (1.5). Если устремить параметр λqN к единице, то подвижность обратится в нуль. Качественно это правильный результат, так как в очень плотном (и жидком) гелии электроны «локализируются» в «пузырьках», обладающих подвижностью $\sim 0,1 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Конечно, такая экстраполяция не законна. Однако заметим, что условие $\lambda = l$, где l — длина свободного пробега, является критерием локализации, предложенным Моттом ⁴². В разделе в гл. 2 будет показано, что условия $\lambda qN = 1$ действительно являются критерием локализации на малых флуктуациях плотности ⁴³.

д) Аннигиляция медленных позитронов в умеренно плотных инертных газах

Скорость аннигиляции позитрона в среде λ_1 обусловлена его взаимодействием с электронами атомов среды. При малых плотностях λ_1 пропорционально концентрации атомов газа N ³

$$\lambda_1 = \pi r_0^2 c N Z_{\text{eff}}, \quad (1.15)$$

где $r_0 = e^2/mc^2$ — «классический радиус» электрона, c — скорость света, Z_{eff} — эффективное число электронов на один атом газа. Величина Z_{eff} близка к заряду ядра Z , если волновая функция позитрона мало возмущается при рассеянии позитрона на атоме газа, т. е. если взаимодействие между ними мало.

Во многих разреженных газах наблюдались аномально большие значения Z_{eff} , которые, как было показано в ⁴⁴, обусловлены образованием связанных состояний позитрона с атомом (молекулой) газа. Это и другие, ему родственные, явления детально обсуждаются в обзорных работах ^{3, 45}. Ниже мы рассмотрим плотностные эффекты, наблюдаемые в инертных газах, когда образование связанных состояний невозможно и позитрон остается свободным. В этих газах рядом исследователей были обнаружены отклонения от линейного хода $\lambda_1 \sim N$, выходящие за пределы погрешности опыта. Мы полагаем, что эти отклонения родственны плотностным эффектам в подвижности медленных электронов.

Обсудим экспериментальные данные. Скорость аннигиляции определяется при обработке результатов измерения времен жизни в среде большого числа испускаемых позитронов. Время жизни каждого из них изме-

рялось путем детектирования двух гамма-квантов. Первый из них излучался в результате испускания позитрона, а второй являлся одним из тех, которые излучались при аннигиляции. Обработка временных спектров аннигиляции (см., например, ³) дает характеристики ряда явлений, в том числе и величину λ_1 . Она содержится в показателе экспоненты $\exp(-\lambda_1 t)$, аппроксимирующей одну из короткоживущих компонент кривой временного распределения аннигиляции позитронов (рис. 6).

Часть позитронов, попадающих в среду, еще до своей термализации образует легкие атомы позитрония. Со временем эти позитроны также аннигилируют. Скорость аннигиляции ортопозитрония представима в виде

$$\lambda_2 = \lambda_v + \Delta\lambda_2, \quad \Delta\lambda_2 = 4\pi r_0^2 Z_{\text{eff}}^1 N. \quad (1.16)$$

При $N \rightarrow 0$ величина λ_2 стремится к вакуумному значению $\lambda_v = 7,2 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$. Скорость pick-off-аннигиляции (или скорость «тушения») $\Delta\lambda_2$ обусловлена

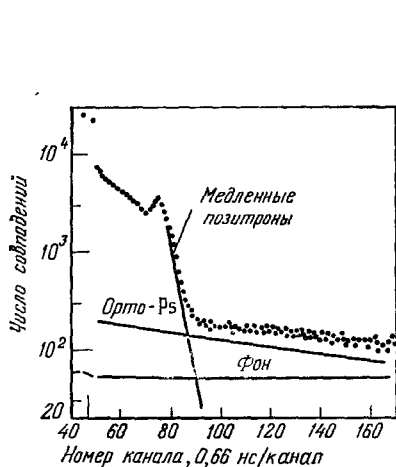


Рис. 6. Временной спектр аннигиляции позитронов в He^4 ⁴⁸ при $T = 5,5 \text{ K}$ ($\rho = 0,023 \text{ г·см}^{-3}$).

Показаны позитронная и ортопозитрониевая компоненты (орто- Ps) и фон.

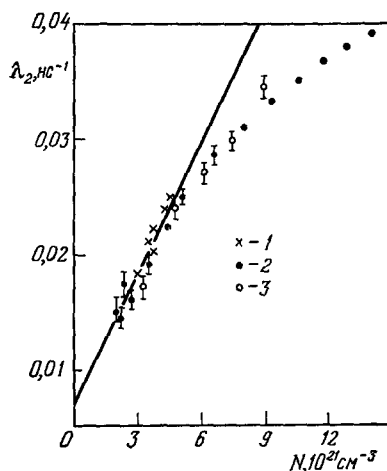


Рис. 7. Скорость аннигиляции ортопозитрония в зависимости от плотности гелия.

Экспериментальные точки: 1 — из работы ⁴⁶ при $T = 300 \text{ K}$, 2 и 3 — из работ ⁴⁸ и ³⁰ при 77 K ; прямая соответствует $Z_{\text{eff}} = 0,125$ по измерениям ⁴⁹ при малых N .

взаимодействием с электронами среды. Величина Z_{eff}^1 — эффективное число электронов на атом газа, находящихся в синглетном состоянии относительно спина позитрона в атоме Ps . Величина $\lambda_2(N)$ определяется из тех же временных спектров аннигиляции. При больших N в некоторых работах наблюдалась нелинейность в ходе $\lambda_2(N)$. Она представляет для нас не меньший интерес, чем такой же эффект в ходе $\lambda_1(N)$. По характеру своего взаимодействия с атомами газа позитроний очень похож на электрон в гелии, обладая положительной длиной рассеяния L порядка a_0 .

Результаты измерения скорости аннигиляции ортопозитрония в плотном гелии представлены на рис. 7. Отклонения от линейной зависимости возникают при $T = 77 \text{ K}$, начиная с $N \approx 5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ^{30, 47, 48}, и растут с ростом N . Эти отклонения заметно уменьшают скорость аннигиляции.

Значительно более слабые, но систематические плотностные эффекты были обнаружены и при аннигиляции позитронов. В работе ⁴⁸ $\lambda_1(N)$ в гелии при 77 K начинало расти несколько медленнее, чем пропорционально N , при $N \gtrsim 8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Наоборот, в криптоне при 300 K $\lambda_1(N)$ растет более быстро, начиная с $N \approx 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ⁴⁹.

Главным образом в связи с экспериментами с Рs в ряде работ обсуждаются причины, приводящие к нелинейной зависимости скорости аннигиляции^{30, 47, 48, 50, 52}. Образование позитрониевых пузырьков в условиях указанных экспериментов еще невозможно, см. раздел б) гл. 2. Причиной аномалии может служить эффект рассеяния на нескольких атомах⁵⁰ либо эффект исключенного объема^{29, 30}. Второй из них в газе менее существен, ибо определяется параметром $(32\pi/3) L^3 N$. При $N = 5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ он составляет 0,084, так как $L = 1,5a_0$. Что же касается первого эффекта, то он, дополнительно возмущая волновую функцию рассеиваемого позитрония, тоже уменьшает Z_{eff} и определяется параметром $\lambda q N$ (см. гл. 1, а)). Этот параметр составляет 0,64.

Обсудим аномалии в λ_1 . В гелии Z_{eff} уменьшается, по-видимому, по той же самой причине. Параметр $\lambda q N$ при $N = 8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ составляет 0,07, поскольку $L = -0,45a_0$. В соответствии с малым значением параметра невелико и наблюдаемое отклонение от линейного хода $\lambda_1(N)$. Увеличение Z_{eff} в кryptonе, по-видимому, связано с поляризационным эффектом (см. гл. 1, а)), который ослабляет взаимодействие позитрона с атомами среды. Параметр $4\pi^2 \alpha^2 N (3a_0 r_0 L)^{-1}$, определяющий величину этого эффекта³⁴, составляет 0,037, если $L = -4a_0$, $r_0 = a_0$.

2. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА, ПОЗИТРОНА И ПОЗИТРОНИЯ В ПЛОТНЫХ ГАЗАХ

Явление автолокализации легкой частицы в среде давно известно в физике конденсированного состояния⁵³. Такой частицей является, например, полярон⁵⁴. В неупорядоченной среде связанные состояния электрона (позитрона, позитрония) возможны, если имеется выигрыш свободной энергии системы при конкуренции энергии связи электрона в поле данной флуктуации плотности и работы, затраченной на создание этой флуктуации^{5, 55}. Переход в связанное состояние происходит при повышении плотности или понижении температуры — оба эти фактора усиливают эффект взаимодействия. Характер автолокализованного (флуктуонного) состояния зависит от характера взаимодействия электрона с атомами (молекулами) вещества. При преобладании сил отталкивания электрон локализуется на флуктуации разрежения — возникает «пузырек». При преобладании притяжения возможна локализация на уплотнении — возникает «кластер». Возможны и образования смешанного типа⁶.

Переход электронов в связанное состояние радикально влияет на ряд свойств вещества. Первыми были обнаружены позитрониевые пузырьки, благодаря тому, что время аннигиляции позитрония в жидком гелии оказалось в несколько раз больше ожидаемого^{56, 57}. Почти одновременно с открытием необычно большого времени жизни позитрония было обнаружено аномальное поведение электронов, инжектированных в жидкий гелий⁵⁸⁻⁶⁰. Подвижность электрона соответствовала подвижности массивного образования (десятки M), а не подвижности легкой частицы. Объяснение этим эффектам было дано Ферреллом²⁹ и Купером⁶¹. Сильное обменное отталкивание между позитронием (электроном) и атомами He делает выгодной локализацию легкой частицы в полости. Радиус полости составляет 15—18 Å, а из нее вытесняется $\sim 10^3$ атомов He. Свойства пузырьков в жидкости хорошо изучены^{62-65, 7, 28}. Пузырьки наблюдались не только в гелии, но и в ряде других неполярных жидкостей^{66, 67}.

Изучение автолокализованных состояний в плотных газах начинается, по-видимому, с эксперимента Левина и Сандерса⁶⁸ по определению подвижности электрона в газообразном гелии. Электронные пузырьки обсуждаются в разделе а). Следующий раздел б) посвящен позитрониевым

пузырькам и аннигиляции позитрония в газах. Возникновение кластеров в плотных газах возможно, если поляризуемость атомов велика ^{69, 70}. В разделе в) обсуждаются также и «ориентационные» кластеры в среде дипольных молекул. Аномалии в скорости аннигиляции позитронов в плотном газе, которые были интерпретированы как результат уплотнения газа вокруг позитрона, были впервые обнаружены в работах ^{71, 72}. В работе ⁷³ было показано, что позитроны в плотных газах переходят в автолокализованные состояния, построена кривая перехода в связанное состояние и предсказано наличие критической точки явления кластеризации. Измерения ^{74, а} подтвердили теоретические оценки. Эти вопросы обсуждаются в разделе г).

а) Электронные пузырьки в плотных газах

Убедительное доказательство существования электронных пузырьков в плотном газообразном гелии было сделано Левиным и Сандерсом ⁶⁸. Вре́мяпролетным методом измерялась зависимость подвижности от плотности гелия при $T = 4,2$ К. Оказалось, что при малых N значение μ соответствует подвижности свободных электронов, а при больших N значения μ близки к подвижности электронов в жидком гелии. Скачок $\mu(N)$ происходит в очень узкой области: при изменении плотности всего в несколько раз подвижность меняется более чем на пять порядков (рис. 8). Качественное объяснение этого эффекта также было дано Левиным и Сандерсом ⁷⁶. Они предположили, что при больших плотностях электроны локализованы в пузырьках, как и в жидком гелии. С понижением плотности образование пузырьков становится менее выгодным и при низких плотностях все электроны свободны. Их подвижность может на несколько порядков превышать подвижность пузырьков.

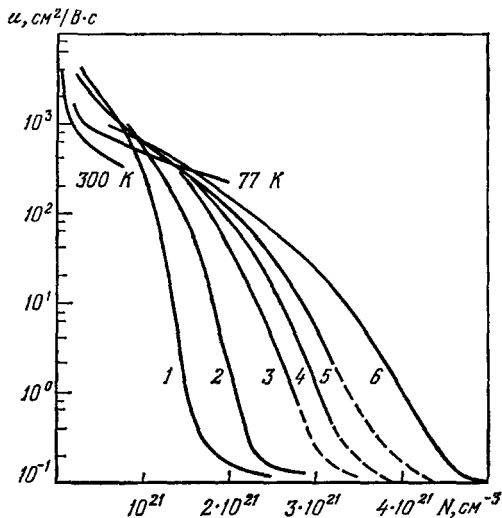


Рис. 8. Зависимость от плотности N подвижности электронов μ в плотном газообразном гелии.

Температура T (К) = 4,2 (1), 7,3 (2), 11,6 (3), 13,8 (4), 18,1 (5) ⁷⁵ и 20,3 (6) ⁷⁶.

Если локализация возможна, то отношение концентраций свободных n_f и локализованных n_b электронов определяется величиной и знаком изменения свободной энергии системы ΔF , вызванного одним актом локализации

$$\frac{n_f}{n_b} = A \exp(\beta \Delta F). \quad (2.1)$$

Определение величины ΔF , стоящей в показателе экспоненты, составляет основную задачу теории автолокализованных электронных состояний. Вообще говоря, в правой части выражения (2.1) должно стоять среднее по всем возможным конфигурациям атомов, реализующим локализованные состояния электронов. Однако в первом приближении достаточно учесть лишь оптимальную флуктуацию концентрации атомов, т. е. такую,

которая приводит к наибольшему уменьшению свободной энергии системы вследствие локализации электрона. Результат будет тем точнее, чем более глубокой и широкой (а следовательно, и маловероятной) окажется оптимальная флуктуация, реализующая данное состояние.

Предэкспоненциальный множитель A , входящий в (2.1), учитывает поступательные, вращательные и колебательные степени свободы пузырька. Его корректное вычисление связано с большими трудностями, по сути дела с теми же самыми, с которыми сталкивается теория нуклеации при определении концентрации зародышей новой фазы. Обычно предполагают, что экспоненциальный множитель имеет величину порядка единицы и слабо зависит от плотности и температуры газа по сравнению с $\exp(\beta\Delta F)$.

Ниже получены условия возникновения пузырьков и их основные параметры, проведено сопоставление с экспериментами и обсуждены некоторые более сложные вопросы.

1) Простейшая модель. Предположим, что электрон локализуется в сферической полости радиуса R , свободной от атомов гелия (модель «пустой прямоугольной ямы») ⁷⁶⁻⁷⁸. Тогда

$$\Delta F = -\varepsilon(R) + \frac{4\pi}{3} R^3 p, \quad (2.2)$$

где $\varepsilon(R)$ — энергия связи электрона, а p — давление газа. Второе слагаемое в (2.2) соответствует работе, которую необходимо затратить на создание полости.

Свободный электрон находится в среднем поле окружающих его атомов, величина которого в приближении оптического псевдопотенциала составляет $2\pi\hbar^2 NL/m$, где L — длина рассеяния электрона на атоме ⁷⁹. Энергия связи локализованного электрона меньше этой величины на энергию его колебаний в пузырьке. Последняя хорошо известна для прямоугольной ямы ⁸⁰. Предположим, для простоты, что в пузырьке имеется несколько уровней. Тогда $\varepsilon(R) \approx (2\pi\hbar^2 NL/m) - (\pi^2\hbar^2/2mR^2)$. Оптимальный размер пузырька R_0 можно получить из условия минимума ΔF

$$R_0^3 \approx \frac{\pi\hbar^2}{4mp}. \quad (2.3)$$

Если пренебречь ролью предэкспоненциального множителя в (2.1), то нетрудно получить простую связь между плотностью N_k , давлением p_k и температурой T_k на линии перехода электронов из свободного в локализованное состояние, которую естественно определить условием $\Delta F(R_0) = 0$. Получаем

$$\frac{\hbar^2 N_k L}{m_{Fk}^{2/5}} = \frac{5}{3} \left(\frac{\pi}{4} \right)^{3/5}. \quad (2.4)$$

В достаточно разреженном газе $p = NT$

$$N_k L^{5/3} \lambda_\beta^{4/3} = c, \quad R_k^3 = \frac{6}{5} L \lambda_\beta^3, \quad (2.5)$$

где $\lambda_\beta = \hbar/\sqrt{2mT}$ — тепловая длина волны электрона, а $c = \pi (5/3)^{5/3} \cdot 2^{-8/3} \approx 1,16$. Эта связь между N_k и T_k была получена в ^{78, 81}.

В He^4 , где $L = 0,62 \text{ \AA}$, при $T_k = 4,2 \text{ K}$ формула (2.5) дает $N_k = 5,2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. По порядку величины это значение является правильным и, что более существенно, правильной является качественная зависимость $N_k \sim T_k^{2/3}$. Последнее следует из рис. 9, полученного при обработке данных представленных на рис. 8.

От столь простой модели нельзя требовать количественного согласия с экспериментом. Это обусловлено некорректностью некоторых допущений. Так, мы предполагали малость энергии колебаний электрона в основном состоянии пузырька по сравнению с высотой потенциального барьера

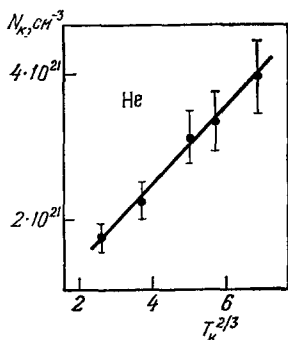


Рис. 9. Зависимость $N_K(T)$.
Кружки — эксперимент ^{26, 75}.

($4NLR_0^2/\pi \gg 1$). В действительности оказывается, что $4NLR_0^2/\pi = 5/3$. Это указывает на необходимость использования точного выражения для $\epsilon(R)$. При этом зависимость (2.5) сохраняется, но константа c уменьшается в нужную сторону, $c \approx 0,59$ ⁷⁸.

Простота использованной модели обусловлена тем, что зависимость ϵ от R известна. Тем же достоинством обладают модели, рассмотренные в работах ^{23, 26, 75, 82, 83}, где получены близкие результаты. В этих работах форма ямы тоже постулировалась. На самом деле она должна определяться самосогласованным решением задачи.

2) Приближение самосогласованного поля. Полный вывод выражений самосогласованного поля можно найти в работах ^{5, 6, 43, 76}. Здесь мы их запишем, исходя из простых качественных соображений.

Рассмотрим в классическом пределе свободную энергию F системы, представляющей собой электрон в идеальном газе. Та часть F , которая обусловлена взаимодействием, равна $NT \int d\mathbf{r} (1 - e^{-\beta V})$, где N — плотность атомов, а $V(\mathbf{r})$ — потенциал взаимодействия электрона с атомом. В отсутствие корреляции между электроном и атомами эта величина равнялась бы $N \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. Таким образом, изменение свободной энергии системы ΔF , вызываемое появлением корреляций в положении атомов, равно

$$\Delta F = -NT \int [e^{-\beta V(\mathbf{r})} - 1 + \beta V(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (2.6)$$

Обобщение этого выражения на квантовый случай очевидно. Во-первых, необходимо $V(\mathbf{r})$ заменить на $\tilde{V}(\mathbf{r}) = \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r}'$, где ψ — волновая функция локализованного электрона. Во-вторых, надо учесть, что вследствие нулевых колебаний среднее значение кинетической энергии электрона отлично от нуля. Это дает

$$\beta \Delta F = \lambda_\beta^2 \int |\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} - N \int [e^{-\beta \tilde{V}(\mathbf{r})} - 1 + \beta \tilde{V}(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (2.7)$$

Соответственно распределение атомов вокруг электрона дается не формулой $N(\mathbf{r}) = N \exp(-\beta V)$, а более сложной

$$N(\mathbf{r}) = N e^{-\beta \tilde{V}(\mathbf{r})} = N \exp \left[-\beta \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r}' \right]. \quad (2.8)$$

Теперь для ответа на вопрос о возможности локализации электрона необходимо найти волновую функцию электрона в самосогласованном потенциале $\int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [N(\mathbf{r}') - N] d\mathbf{r}'$. Такое самосогласованное уравнение типично для теории локализованных состояний в неупорядоченных системах. Оно является частным случаем метода оптимальной флуктуации, предложенного в работах ^{11, 12, 84} и широко используемого в теории

конденсированных неупорядоченных систем^{4, 6, 9, 85}. Аналитическое решение записанных уравнений, по-видимому, невозможно, поскольку не для всех атомов известен вид потенциала $V(\mathbf{r})$ и, кроме того, уравнения оказываются нелинейными.

Задача существенно упрощается для газов, атомы которых обладают малой поляризуемостью (например, гелий) и при условии, что длина волны электрона значительно превышает радиус действия сил электрон — атом. Тогда для $V(\mathbf{r})$ можно воспользоваться псевдопотенциалом (1.3). Это дает для $\tilde{V}(\mathbf{r})$

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = 2\pi\hbar^2 L |\psi(\mathbf{r})|^2 m^{-1}. \quad (2.9)$$

Решение будем искать, используя прямой вариационный метод.

Воспользуемся простейшей аппроксимацией для волновой функции основного состояния электрона в пузырьке

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{\pi\lambda^2}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda^2}\right) \quad (2.10)$$

Эта пробная функция является точной для основного состояния осциллятора. Можно надеяться, что (2.10) является хорошим приближением. После подстановки (2.10) в (2.9) и (2.7) ΔF становится функцией только одного параметра λ — длины волны электрона в пузырьке

$$\beta\Delta F = 3\frac{\lambda_\beta^3}{\lambda^2} - \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} N\lambda^3 \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{B^n}{n! n^{3/2}}, \quad (2.11)$$

где

$$B = 8\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{L\lambda_\beta^3}{\lambda^3}. \quad (2.12)$$

Как и в модели прямоугольной ямы из условий $\Delta F = 0$ и $\partial\Delta F/\partial\lambda = 0$ нетрудно получить оптимальный размер пузырька λ_K и связь между плотностью газа и температурой на линии перехода $N_K(T_K)$. Последняя совпадает с (2.5), но константа $c \approx 0,42$. При $T_K = 4,2$ К величина $N_K = 1,9 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$, что уже весьма близко к той плотности, при которой наблюдается скачок подвижности электронов (рис. 8).

Полученные результаты справедливы, если выполняются условия применимости оптического псевдопотенциала $L \ll \lambda_K$, $N_K L^3 \ll 1$ и условие макроскопичности пузырька $N_K \lambda_K^3 \gg 1$. Используя выражение (2.5), можно видеть, что они выполняются на линии перехода, если $L \ll \lambda_\beta$. Приведем некоторые оценки. При $T_K = 4,2$ К величина $\lambda_\beta = 100 \text{ \AA}$, оптимальный размер пузырька $\lambda_K = 25 \text{ \AA}$, число вытесненных атомов — более сотни. Следовательно, теория применима.

3) Основные характеристики пузырьков. На рис. 10 представлены типичные профили плотности пузырьков в He^4 при $T = 7,3$ К. Размер пузырька ($R \approx 25 \text{ \AA}$) немного уменьшается с ростом N при постоянной температуре, а его форма становится все ближе к прямоугольной. Остаточное число атомов внутри пузырька уменьшается.

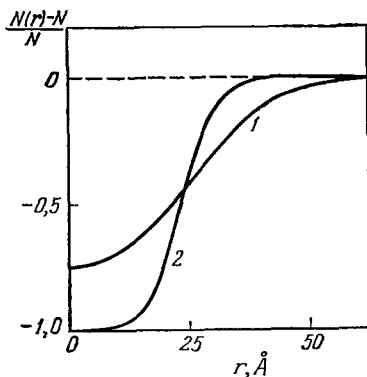


Рис. 10. Зависимость концентрации атомов He^4 внутри пузырька от расстояния до центра пузырька при $T = 7,3$ К.

Кривая 1 — $N = 2,5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, 2 — $5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$.

Энергия связи электрона в пузырьке при тех же условиях меняется от 0,07 эВ при $N = 2,5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ до 0,1 эВ при $N = 5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Оптимальные пузырьки содержат два-три уровня. Это указывает на неприменимость квазиклассического описания локализованных электронных состояний, использованного в ⁸⁶⁻⁸⁹. Критика этих работ содержится также в ⁹⁰.

Для определения структуры состояний электронов в пузырьках большое значение имеют оптические эксперименты. В газе такие эксперименты

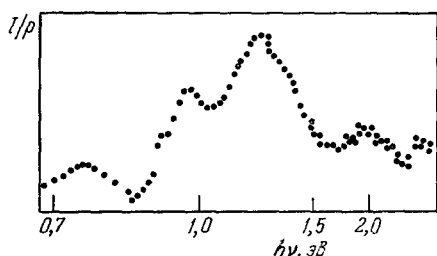


Рис. 11. Зависимость величины детектируемого сигнала I/p (I — детектируемый ток, p — световой поток) от энергии электрона ⁹¹.

пока отсутствуют. В жидком гелии наблюдался скачок тока (следовательно, подвижности) под действием электромагнитного излучения ⁹¹. Эффект обусловлен фотоионизацией пузырьков. На рис. 11 приведена зависимость величины детектируемого сигнала от энергии фотона $h\nu$ ⁹¹. Максимум при $h\nu \approx 0,9$ эВ соответствует фотоионизации пузырька, а при $h\nu \approx 0,7$ эВ — переходу $1s \rightarrow 3p$ ^{91, 92}. Теоретически изучалась также возможность прямого оптического поглощения и рамановского рассеяния света пузырьками ^{93, 94}. Оценки показали, что для

надежной регистрации этих эффектов необходима концентрация электронов порядка 10^{12} см^{-3} . Пока в реальных экспериментах такие концентрации недостижимы.

На рис. 8 были приведены зависимости подвижности инжектированных электронов от плотности. При низких температурах имеет место скачок подвижности так, что плотность возникновения пузырьков N_k тем самым измерена. При высоких T переход становится более плавным. В работах ²³⁻²⁶ измерены $\mu(N)$ при высоких температурах $20 < T < 160$ К. Мы остановимся на вопросе о подвижности лишь кратко, поскольку он обсуждается в обзоре Шикина ⁶³.

При наличии в переходной области как свободных, так и связанных электронов для μ можно записать выражение ⁹⁵

$$\mu = \frac{\mu_f n_f + \mu_b n_b}{n_f + n_b}, \quad (2.13)$$

где μ_f и μ_b — подвижности свободных электронов и пузырьков. Заметим сначала, что для μ_f газокинетическое приближение при таких плотностях становится неприменимым (раздел 1). В работе ⁹⁶ была сделана первая попытка измерить μ_f в условиях, когда присутствуют электроны «обоих сортов». Зависимость $\mu_f(N)$ становится скорее экспоненциальной, но она значительно более плавная по сравнению с $\mu(N)$. Теоретическое исследование $\mu_f(N)$ представило бы несомненный интерес, поскольку выполненные к настоящему времени работы ^{86, 87, 97-99} еще не решили эту задачу.

Для подвижности пузырьков в жидком He, как известно, хорошо применимо стоковское приближение. При больших N его использование обосновано и в газах. В более разреженных газах можно было бы использовать кнудсеновское приближение. Однако при плотностях перехода реализуется промежуточный режим и не имеется ничего лучшего, кроме интерполяционной формулы ⁷⁶

$$\mu_b^{-1} \approx \mu_c^{-1} + \mu_k^{-1}, \quad \mu_c = \frac{e}{6\pi\eta R}, \quad \mu_k = \frac{3e}{8NR^2 \sqrt{2\pi MT}}, \quad (2.14)$$

здесь R — радиус пузырька, η — вязкость газа, M — масса атома. Следует отметить, что эти выражения не учитывают возбуждения внутренних степеней свободы, которое может иметь место при взаимодействии пузырька со средой.

Поверхность пузырька может испытывать колебательное движение. Наличие возбужденных колебаний может быть существенным при определении соотношения n_i/n_b , оно может приводить к уширению электронных уровней, способствовать релаксации электронов в локализованные состояния, влияя на подвижность. Колебания пузырьков в жидком Не рассмотрены в работах ^{94, 100, 101}. Естественно, что минимальным колебательным квантом $\hbar\omega$ обладает сферическая мода. Рассмотрение в газе колебаний полости, содержащей электрон, приводит к выражению

$$\omega^2 = \frac{1}{4\pi M N R_0^3} \left. \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \right|_{R=R_0}, \quad (2.15)$$

где $F(R)$, как и ранее, — свободная энергия. Величину $2\pi N R_0^3 M/3$ естественно назвать эффективной массой пузырька m^* . В гидродинамическом приближении она совпадает с присоединенной массой. Ее оценку можно сделать, используя для m^* известное значение присоединенной массы пузырька в плотной среде, равное половине массы вытесненных атомов ⁷⁹. $m^* \approx 2\pi N R_0^3 M/3$, где M — масса атома газа. В жидком гелии эти значения m^* согласуются с результатами измерений, $m^* \approx 100M$ ¹⁰². В газе при $T = 4,2$ К на линии перехода $m^* = (2\pi/3) M N R_0^3 = 32M$. В работе ¹⁰³ величина m^* была косвенно измерена и оказалась неожиданно малой, $3 \leq m^*/M < 5$. Этот результат остается непонятным.

Формулу (2.15) перепишем в виде

$$\omega^2 = 5T (M R_0^3)^{-1}.$$

При $T = 4,2$ К и $N = 1,5 \cdot 10^{21}$ см⁻³ величина $\hbar\omega \approx 0,8$ К. Следовательно, эти колебания возбуждены. Однако их роль в предэкспоненте формулы (2.1) мала, как это обычно и предполагается.

Поверхностное натяжение в жидкости играет существенную роль. Поверхностная свободная энергия ΔF_s , определяемая как избыточная свободная энергия, обусловленная недостатком соседей у частиц поверхностного слоя ¹⁰⁴, конкурирует в выражении для ΔF с изменением объемной свободной энергии $\Delta F_g = (4\pi/3) p R^3$. В разреженном газе поверхностная энергия вообще отсутствует, а в умеренно плотном газе может быть выражена через второй вириальный коэффициент $B(T)$:

$$\beta \Delta F_s = - (4\pi R^2) N_s N B,$$

где $N_s \approx N^{2/3}$ — поверхностная плотность атомов. Сопоставляя ΔF_s с ΔF_g , видим, что в газе роль этих эффектов мала, поскольку

$$\frac{\Delta F_g}{\Delta F_s} = \frac{R N^{1/3}}{N B} \gg 1.$$

б) Позитрониевые пузырьки и скорость аннигиляции позитрония

Электронные пузырьки образуются вследствие сильного обменного отталкивания между электроном и атомами газа (роль поляризационного взаимодействия мала). Поэтому все, что было сказано выше по отношению к электронным пузырькам, можно непосредственно перенести на позитрониевые пузырьки, так как взаимодействие позитрония с атомами газа также носит отталкивательный характер. Так, например, зависимость

плотности газа N_{κ}^{Ps} , при которой становится выгодным образование позитрониевых пузырьков, от температуры нетрудно выразить через аналогичную величину N_{κ} , полученную для электронов (2.5):

$$N_{\kappa}^{Ps}(T) = 2^{2/3} \left(\frac{L_e}{L_{Ps}} \right)^{5/3} N_{\kappa}(T); \quad (2.16)$$

здесь L_e и L_{Ps} — длины рассеяния электрона и позитрония на атоме и учтено, что масса позитрония равна $2m$. В частности, в гелии, где $L_e \ll L_{Ps}$, области существования электронных и позитрониевых пузырьков практически совпадают.

1) Скорость аннигиляции позитрония. В условиях слабого взаимодействия Ps с атомами газа скорость аннигиляции $\lambda_2(N)$ линейно возрастает с ростом N или испытывает слабую нелинейность (см. гл. 1, д)).

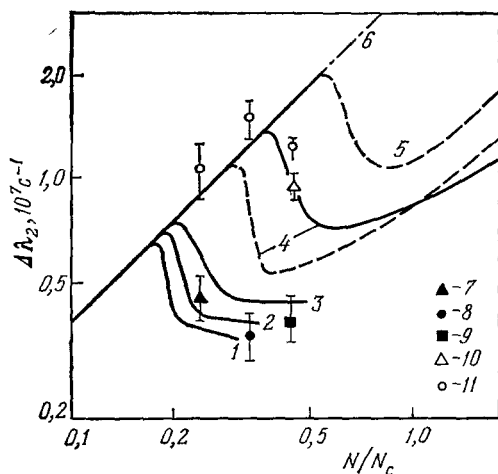


Рис. 12. Зависимость скорости pick-off-аннигиляции позитрония от приведенной плотности в He^4 .

Сплошные кривые — численный расчет ^{10a}, штриховые — по формулам (2.25), (2.26). Значки — эксперимент ^{4b}. Температура T (К) = 4,8 (1 и 7), 5,4 (2 и 8), 6,4 (3 и 9), 13 (4 и 10), 30 (5 и 11) и 300 (6).

Переход атомов Ps в пузырьковое состояние приводит к качественным изменениям в зависимости $\lambda_2(N)$ (рис. 12). Скорость аннигиляции резко уменьшается при $N \sim N_{\kappa}$, что обусловлено разрежением газа вокруг позитрония. В газобразном He^4 эти эффекты впервые наблюдались авторами работ ^{71, 72}.

Обсудим зависимости $\lambda_2(N)$ с учетом возможности нахождения Ps в пузырьке. Аналогично (2.13) можно записать следующую формулу для $\Delta\lambda_2$ -скорости pick-off-аннигиляции

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_2 &= \frac{\Delta\lambda_f n_f + \Delta\lambda_b n_b}{n_f + n_b} = \\ &= \Delta\lambda_f \left(1 + \xi \frac{n_b}{n_f} \right) \left(1 + \frac{n_b}{n_f} \right)^{-1}; \end{aligned} \quad (2.17)$$

здесь n_b/n_f — отношение вероятностей нахождения Ps в связанном и свободном состоянии, $\Delta\lambda_b$ и $\Delta\lambda_f$ — соответствующие скорости тушения. Величина $\Delta\lambda_f \sim N$ в соответствии с (1.16). Выражение для $\Delta\lambda_b$ является более сложным,

$$\Delta\lambda_b = 4\pi r_0^2 c Z_{\text{eff}}^2 \int N(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (2.18)$$

где $N(\mathbf{r})$ — распределение концентрации атомов в пузырьке, $\psi(\mathbf{r})$ — волновая функция Ps в нем. Таким образом,

$$\xi = \frac{\Delta\lambda_b}{\Delta\lambda_f} = N^{-1} \int N(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \quad (2.19)$$

Следовательно, скорость тушения (2.17) определяется относительными величинами n_b/n_f и ξ . Она может быть вычислена на основе результатов исследования системы позитроний + газ в состоянии равновесия.

Используем результаты предыдущего раздела. Согласно (2.8) $N(\mathbf{r}) = N \exp(-\beta\tilde{V})$. Выбирая пробную волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{2\pi\lambda^3}} \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda^2}\right), \quad (2.20)$$

получаем выражение для ξ :

$$\xi = \frac{1}{\beta\tilde{V}(0)} \{1 - \exp[-\beta\tilde{V}(0)]\}, \quad (2.21)$$

где $\beta\tilde{V}(0) = 6L\lambda_p^3/\lambda^3$, λ — длина волны локализованного Ps. Естественно, что λ близко к R_0 (2.3). Точное выражение, соответствующее $\psi(\mathbf{r})$ (2.20), отличается лишь численным множителем¹⁰⁵

$$\lambda^5 = \frac{2^{2/3}\Gamma(1/3)}{2\pi} \frac{\hbar^2}{m_{\text{Ps}} p}, \quad (2.22)$$

здесь p — давление газа, m_{Ps} — масса атома позитрония.

Полученные выражения позволяют провести качественный анализ скорости тушения $\Delta\lambda_2$ от плотности и температуры газа, когда $p = NT$. Рассмотрим, например, $\Delta\lambda_2(N)$ на изотерме. При малых плотностях образования пузырьков невыгодно и $\Delta\lambda_2 \approx \Delta\lambda_f \sim N$. При достижении плотности $N = N_K$ величина $\Delta\lambda_2$ начинает падать и при $N > N_K$ приобретает значение $\Delta\lambda_2 = \Delta\lambda_b = \xi\Delta\lambda_f$, в несколько раз меньшее $\Delta\lambda_f$ и далее плавно меняющееся при увеличении N , $\Delta\lambda_2 \sim N^{2/5}$. Описанный ход $\Delta\lambda_2(N)$ соответствует результатам наблюдений (рис. 12, 13).

2) Скорость аннигиляции позитрония в неидеальном газе. Недавние эксперименты^{46, 106, 107} по аннигиляции позитрония выполнены в более широком диапазоне плотностей, чем эксперименты по подвижности электронов. При больших плотностях газ уже нельзя считать идеальным и необходимо учесть взаимодействие между атомами газа. Наиболее важным является учет отталкивания между атомами, которое препятствует образованию пузырьков и может привести к их полному исчезновению.

При записи изменения свободной энергии газа при локализации позитрония ΔF_g воспользуемся моделью решетчатого газа

$$\beta\Delta F_g = \Delta S = \int \left[N(\mathbf{r}) \ln \frac{N(\mathbf{r})}{N} - \frac{1 - N(\mathbf{r})b}{b} \ln \frac{1 - N(\mathbf{r})b}{1 - Nb} \right] d\mathbf{r}, \quad (2.23)$$

где константа b характеризует межатомное отталкивание. Минимизируя изменение свободной энергии $\Delta F = -\varepsilon + \Delta F_g$ по отношению к $N(\mathbf{r})$ ($\delta\Delta F/\delta N = 0$), получаем выражение для распределения атомов в пузырьке:

$$N(\mathbf{r}) = N \exp[-\beta\tilde{V}(\mathbf{r})] [1 + Nb\{\exp[-\beta\tilde{V}(\mathbf{r})] - 1\}]^{-1}. \quad (2.24)$$

В отличие от (2.8), полученное выражение не допускает образования пузырька при $Nb \rightarrow 1$.

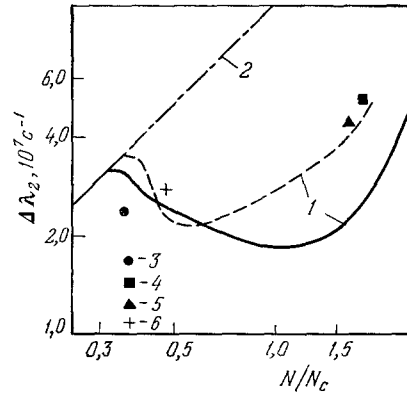


Рис. 13. Зависимость скорости pick-off-аннигиляции позитрония от приведенной плотности в Ne.

Сплошные кривые — численный расчет¹⁰⁵, штриховые — по формулам (2.25), (2.26), значки — эксперимент¹⁰⁶. Температура T (K) = 46 (1 и 3), 44 (4), 45 (5), 47,5 (6) и 300 (2).

Подставляя (2.24) в (2.19) и интегрируя с функцией (2.20), для величины ξ , определяющей скорость тушения позитрония, вместо (2.21) получаем

$$\xi \approx -\frac{1}{Nb\beta\tilde{V}(0)} \ln[1 + Nb\{\exp[-\beta\tilde{V}(0)] - 1\}]. \quad (2.25)$$

Соответственно этому (2.22) перепишем в виде

$$\lambda = \left[\frac{2^{2/3}\Gamma(1/3)}{\pi} \frac{\lambda_{\beta}^3 b}{|\ln(1 - Nb)|} \right]^{1/5}. \quad (2.26)$$

При малых плотностях ($Nb \ll 1$) выражение (2.25) переходит в ранее рассмотренное (2.21). С увеличением плотности становится важным отталкивательное взаимодействие между атомами газа, которое стремится уменьшить размер пузырька, увеличить кинетическую энергию позитрония, а следовательно, должно приводить к увеличению $\Delta\lambda_2$. Из (2.25), (2.26) следует, что еще при умеренных плотностях $Nb \lesssim 1$ в условиях сильного взаимодействия, когда $\beta V(0) \gg 1$, $\Delta\lambda_2 \sim |\ln(1 - Nb)|^{2/5}$.

В пределе максимально сжатого вещества ($Nb \rightarrow 1$) величина ξ резко стремится к единице, а $\Delta\lambda_2 \rightarrow \Delta\lambda_f$. Следовательно, при больших плотностях пузырьки исчезают. Этот вывод получен в рамках модели, учитывающей только межатомное отталкивание. Он справедлив лишь при высоких T , когда влияние межатомного притяжения мало, т. е. когда $T_c N \ll \ll TN_c$, где T_c и N_c — критические параметры газа.

Для количественного сопоставления с экспериментами в ¹⁰⁵ были проведены вычисления скорости аннигиляции, исходя из более точных выражений для свободной энергии, позволяющих лучше учесть свойства среды. Результаты численного расчета $\Delta\lambda_2$ для He⁴ приведены на рис. 12. Наилучшее согласие с экспериментом ⁴⁶ было получено для длины рассеяния позитрония на атоме $L = 1,5a_0$. Эта величина L хорошо соответствует расчетным величинам, полученным в ¹⁰⁸⁻¹¹⁰.

На рис. 12 пунктиром показан результат расчета $\Delta\lambda_2$ в рамках приближенной модели (2.25), (2.26). Она передает качественные особенности хода $\Delta\lambda_2(N)$.

В последнее время были выполнены измерения скорости аннигиляции позитрония в He³ ¹⁰⁷ и He ¹⁰⁸. Обнаруженные эффекты указывают на наличие пузырьков. На рис. 13 показаны экспериментальные данные в He и результаты расчета ¹⁰⁵.

3) Вре́мя локализации. До сих пор мы рассматривали свойства пузырьков в состоянии термодинамического равновесия. Большой интерес вызывает также и кинетика образования пузырьков. Здесь наиболее важной характеристикой является время образования пузырька τ , т. е. время релаксации позитрония (электрона) из свободного в пузырьковое состояние.

Время релаксации позитрония в жидком гелии во всяком случае меньше времени аннигиляции пара-позитрония в вакууме $\tau_0 \approx 10^{-10}$ с. В самом деле, в работе ¹¹¹ были обнаружены и исследованы пара-позитрониевые пузырьки в жидком He. Они не могли бы возникать, если бы $\tau < \tau_0$. За время, меньшее чем τ_0 , позитроний должен потерять энергию ($E_1 - Ry/2$), определяемую нижней границей щели Оре (E_1 — потенциал ионизации атома), и перейти в связанное состояние с образованием полости. Последовательная кинетическая теория локализации в настоящее время отсутствует, поэтому мы приведем лишь ряд качественных соображений, позволяющих судить о порядке величины τ .

Позитроний, возникший в атомарном газе с энергией $\varepsilon > T$, термализуется, теряя энергию в упругих соударениях (если ε не очень велики). Время термализации имеет порядок $(2m/M) \sqrt{\varepsilon/2m} N^{1/3}$, если учесть, что длина свободного пробега в плотной среде близка к $N^{-1/3}$. Время термализации близко к 10^{-11} с, если $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon = 1$ эВ. Если $N \leq N_k$, термализовавшиеся атомы Ps локализируются. Оценим это время τ , исходя из представлений о двух этапах этого процесса, $\tau = \tau_1 + \tau_2$.

На первом этапе позитроний, находясь в поле флуктуаций с дефектом плотности, $n = N(r) - N < 0$, термализуется. Время торможения оценим, опять-таки, исходя из потерь при упругих столкновениях, $\tau_1^{-1} = (2m/M) \sqrt{T/m} N^{1/3}$, что дает $\tau_1 \approx 10^{-10}$ с при $T_j = 4,2$ К, $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. На самом деле τ_1 может быть меньше за счет потерь энергии при неупругих столкновениях, приводящих к возбуждению колебаний флуктуаций и т. п. Время τ_1 должно быть меньше или равно времени жизни флуктуации $\tau_f \approx R^2/6D$, где R — размер флуктуации, D — коэффициент диффузии газа. Всегда найдется мелкая гауссова флуктуация, но среди них наиболее интересны те, которые имеют один, пусть слабо связанный уровень энергии для позитрония. Тогда размер флуктуации связан с n соотношениями $R \approx (2\pi Ln)^{-1/2}$, $n = (3N/4\pi R^3)^{1/2}$. Это позволяет оценить в тех же условиях $\tau_f \approx 10^{-10}$ с.

Второй этап локализации соответствует образованию полости. После того, как позитроний потерял свою энергию (и, возможно, был захвачен на слабо связанный уровень), среда начинает воспринимать давление с его стороны. Время τ_2 можно оценить как время расширения полости со скоростью звука или тепловой скоростью: $\tau_2 = R_0/u$. Это дает $\tau_2 \approx 10^{-11}$ с. Следовательно, по этим грубым оценкам в газообразном гелии $\tau \leq 10^{-10}$ с.

Время того же порядка необходимо и для образования электронного пузырька после инжекции электронов в газ. В связи с этим остановимся на измерениях ^{112–114}, позволяющих оценить время термализации электронов в водороде и гелии. В этих опытах катод эммитировал электроны с энергией ~ 1 эВ, далее они дрейфовали к аноду под действием слабого приложенного поля. Катод и анод были разделены энергетическим барьером, образованным силами отображения и этим полем. Если электроны успевали термализоваться до барьера, они не достигали анода. На рис. 14 представлена зависимость от N — времени термализации, они имеют порядок 10^{-12} с. Вопрос о том, почему время термализации уменьшается быстрее чем $1/N$, остается открытым. Возможно, это связано с появлением новых колебательных степеней свободы в плотной среде ¹¹².

Некоторую информацию о кинетических процессах можно найти также в работах ^{115–117}.

4) Энергетический барьер на поверхности среды. Возникновение пузырьков связано с положительным сдвигом границы непрерывного спектра позитрония (электрона) в газе

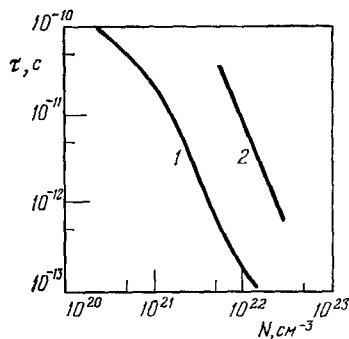


Рис. 14. Зависимость времени термализации горячих электронов от плотности газа. 1 — водород, 2 — гелий ¹¹², ¹¹⁴.

$$E_B = \frac{2\pi\hbar^2 NL}{m}. \quad (2.27)$$

Эта формула, принадлежащая, по-видимому, Ленцу¹¹⁸, в разреженном газе является точной, если $NL^3 \ll 1$. С ростом плотности становится необходимым учет межатомной корреляции, что приводит к следующему выражению^{119, 120}:

$$E_B = 2\pi\hbar^2 NLm^{-1} \left(1 - NL \int \frac{g(r)-1}{r} dr \right), \quad (2.28)$$

где $g(r)$ — парная функция корреляции. Если учесть межатомное отталкивание, полагая, что $g(r) = 0$ при $r \leq r_a$ и $g(r) = 1$ при больших r , то (2.28) дает

$$E_B = 2\pi\hbar^2 LNm^{-1} (1 + 2\pi N L r_a^2). \quad (2.29)$$

При больших значениях параметра $N L r_a^2$ выражение (2.29) неприменимо.

Альтернативным приближением, используемым в плотных средах, когда $r_a \approx r_s$ (r_s — межчастичное расстояние, $(4\pi/3) N r_s^3 = 1$) является приближение Вигнера — Зейтца^{28, 121}. Электрон рассматривается в среде, разбитой на эквивалентные сферы радиуса r_s , каждая из которых содержит в своем центре твердую сферу радиуса L ($L < r_s$). В такой среде электрон тоже имеет конечную минимальную энергию,

$$E_B = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad k_0 r_s = \text{tg}[k_0(r_s - L)]. \quad (2.30)$$

При высоких жидкостных плотностях приближение Вигнера — Зейтца должно давать качественно правильные результаты.

Величина E_B представляет собою энергетический барьер для электронов, инжектируемых из разреженного газа в плотную среду. Поэтому E_B измерено в ряде экспериментов^{91, 114, 122, 123a}. Результаты измерений E_B при инъекции электронов в жидкий Не при $N = 2,2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ неплохо согласуются друг с другом и дают $E_B \approx 1,2 \text{ эВ}$. Это значение и другие, измеренные при $N > 10^{22} \text{ см}^{-3}$, неплохо согласуются с (2.30)¹¹⁴. Оно сильно отличается от величины 0,67 эВ, которую давало бы оптическое приближение (2.27). При $N < 10^{22} \text{ см}^{-3}$ погрешность эксперимента¹¹⁴ становится больше различий между приближениями (2.27) — (2.30). В свою очередь эти различия уменьшаются с уменьшением плотности.

в) Электронные кластеры в тяжелых инертных газах

В предыдущих разделах мы неоднократно подчеркивали, что основной причиной, приводящей к образованию электронных и позитрониевых пузырьков, является сильное обменное отталкивание между этими частицами и атомами газа или жидкости. Однако, кроме короткодействующего отталкивания, существует также дальноедействующее притяжение. В случае позитрония оно носит ван-дер-ваальсовский характер и его роль мала, а длина рассеяния позитрония на атомах положительна. Это указывает на возможность существования позитрониевых пузырьков в любой жидкости или газе при достаточно низких температурах. В случае же электрона поляризационное взаимодействие мало лишь для гелия и водорода, а уже для Не оно сравнимо с обменным взаимодействием. Длина рассеяния на атомах более тяжелых инертных газов отрицательна и взаимодействие электрона с этими атомами носит характер притяжения. Естественно, что существование пузырьков в тяжелых инертных газах и жидкостях невозможно^{28, 116}. Однако связанные состояния электрона со средой возможны и в этом случае⁷⁰. Они реализуются на сгущениях плотности, т. е. в кластерах, что связано в конечном счете с преобладанием при большой поляризуемости сил притяжения.

1) Кластеры большого радиуса. Предположим, что длина волны локализованного электрона является самой большой характерной длиной, значительно превышая радиус действия потенциала $V(r)$. Оказывается, что в этом случае условие кластеризации может быть выражено через амплитуду рассеяния на этом потенциале. Это важно в связи с тем, что далеко не всегда явный вид потенциала $V(r)$ хорошо известен, в то время как об амплитуде рассеяния электрона на атоме (молекуле) имеется экспериментальная информация. Такие кластеры большого радиуса могут существовать в ряде газов, например в ксеноне и в плотных парах воды.

Как обычно, изменение свободной энергии имеет вид

$$\Delta F = K + U + T\Delta S, \quad (2.31)$$

где K — кинетическая энергия электрона, U — его потенциальная энергия в поле, создаваемом атомами газа,

$$U = \left\langle \psi \left| \sum_i V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) - N\bar{V} \right| \psi \right\rangle, \quad \bar{V} = \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.32)$$

Величина поля U зависит от флуктуации атомной плотности, R_i — радиус-вектор i -го атома. Вследствие хаотичного распределения координат атомов плотность вероятности U имеет сложный вид. Предположим, однако, что локализация оказывается наиболее выгодной при малом отклонении U от своей средней величины. В этом случае (приближение случайного поля) плотность вероятности U пропорциональна $\exp(-U^2/2\bar{U}^2)$, где $\sqrt{\bar{U}^2}$ — дисперсия случайного поля. Учитывая, что изменение энтропии пропорционально логарифму вероятности, получаем

$$\Delta F\{\psi, U\} = K + U + \frac{U^2}{2\beta\bar{U}^2},$$

ΔF является функционалом от ψ и U . Минимизируя его относительно U , получаем

$$\Delta F\{\psi\} = K - \frac{1}{2}\beta\bar{U}^2. \quad (2.33)$$

Величину \bar{V}^2 сначала проанализируем в общем виде, выразив ее через фурье-компоненты потенциала $V(q)$ и квадрата волновой функции $\varphi(q)$:

$$V(q) = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad \varphi(q) = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Получаем

$$\bar{U}^2 = N \int \left[\int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi^2(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right]^2 d\mathbf{r} = N (2\pi)^{-3} \int V^2(\mathbf{q}) \varphi^2(\mathbf{q}) d\mathbf{q}. \quad (2.34)$$

Очевидно, что для возможности локализации мелкая флуктуация должна быть достаточно протяженной, а длина волны электрона λ велика. Если она превышает области действия потенциала $V(r)$, то в (2.34) существенны лишь малые $q \lesssim \lambda^{-1}$. Далее учтем, что приближение эффективного радиуса ^{18a, 2} в теории рассеяния медленных электронов на атомах непосредственно связывает $V(q)$ и амплитуду рассеяния $f(q)$: $V(q) = 2\pi\hbar^2 m^{-1} f(q)$. Дело в том, что короткодействующая компонента $V(r)$ может быть описана дельтаобразным псевдопотенциалом, а к дальнедействующей компоненте применимо борновское приближение. Поэтому

$$\bar{U}^2 \approx \frac{N f^2 (\lambda^{-1})}{\lambda^3}, \quad \beta \Delta F \approx \frac{\lambda_B^3}{\lambda^2} [1 - N \lambda_B^3 \lambda^{-1} f^2 (\lambda^{-1})]. \quad (2.35)$$

Таким образом, $\beta\Delta F$ выражено через амплитуду рассеяния электрона на изолированном атоме. Поскольку $f(q)$ хорошо известно из эксперимента, то (2.35) позволяет провести качественный анализ.

Легко убедиться, что локализация возможна, если амплитуда рассеяния убывает с ростом энергии электрона. На рис. 15 показан качественный вид $\Delta F(\lambda)$ при $L < 0$, т.е. для атомов, обладающих эффектом Рамзауэра. При малых N/T величина ΔF монотонно возрастает (кривая 1)

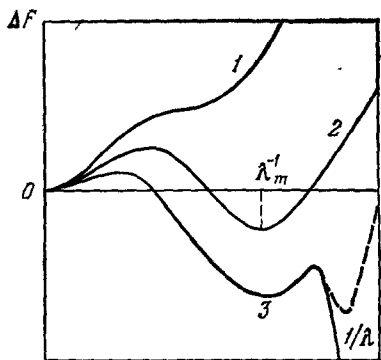


Рис. 15. Качественный вид зависимости изменения свободной энергии ΔF от длины волны электрона λ .

и локализация невыгодна, с ростом N/T значения ΔF становятся отрицательными (кривая 2) и проходят через минимум. Стабилизация кластеров обеспечивается конкуренцией между короткодействующим и поляризационным взаимодействием.

Для дальнейшего анализа воспользуемся выражением $f(q)$ через длину рассеяния L и поляризуемость α :

$$f(q) = L + \frac{\pi\alpha q}{4a_0}. \quad (2.36)$$

Сечения рассеяния электронов на атомах инертных газов, получаемые с помощью (2.36), хорошо согласуются с экспериментальными^{18а, 2}. Подставляя (2.36) в (2.35), мы получаем $\beta\Delta F$, выраженное через две характеристики взаимодействия L и α .

В длинноволновом пределе этой информации о $V(r)$ оказывается достаточно. При этом мы избегаем известной трудности, возникающей при учете поляризации, — расходимости потенциала $\alpha e^2/2r^4$ и необходимости его обрезания на малых r (ср. (1.6)).

Из условия минимума свободной энергии ($\partial F/\partial \lambda = 0$) легко получить характерный размер кластера λ_m ^{43, 70}

$$\lambda_m \approx \frac{16\sqrt{\pi}\alpha}{3a_0|L|} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{8\alpha}{3a_0\lambda_\beta^2|L|^3N}} \right). \quad (2.37)$$

Из условия $\Delta F(\lambda_m) = 0$ можно определить плотность $N_K(T)$, начиная с которой связанные электроны преобладают над свободными:

$$N_K(T) \approx \frac{3\alpha}{|L|^3\lambda_\beta^2a_0}. \quad (2.38)$$

Подставляя (2.38) в (2.37), получим значение λ_m^0 , определяющее размер кластеров на линии перехода $N = N_K(T)$:

$$\lambda_m^0 = \frac{4\sqrt{\pi}\alpha}{a_0|L|}. \quad (2.39)$$

При $N = N_K$ энергия связи электрона в кластере $\epsilon = \hbar^2/2m(\lambda_m^0)^2$, кластер содержит один энергетический уровень.

В⁴³ были произведены оценки для Хе, которые впервые указали на возможность существования там электронных кластеров. На рис. 16 рядом с диаграммой равновесия фаз построена зависимость $N_K(T)$ для Хе ($L = -7.1a_0$ ¹³⁷, $\alpha = 27.2a_0^3$). При $N > N_K$ большинство электронов локализовано. При $N \approx N_K$ размеры кластеров близки к 10–15 Å; они содержат около 50 атомов.

Область применимости (2.37) — (2.39) на линии $N = N_K(T)$ определяется из условий применимости гауссова приближения ($|U| \ll \sqrt{U^2}$).

длинноволнового приближения (2.35) ($\lambda \gg |L|$, $\lambda^2 \gg \alpha/a_0$) и требования макроскопичности кластера ($N\lambda^3 \gg 1$). Это дает

$$N_{\kappa} L^2 \lambda_{\beta} \equiv \xi \gg 1, \quad |L| \ll \xi \lambda_{\beta}, \quad \alpha \ll \xi^2 a_0 \lambda_{\beta}^{\frac{2}{3}}, \quad N_{\kappa} \lambda_{\beta}^{\frac{2}{3}} \xi^3 \gg 1. \quad (2.40)$$

Все эти неравенства хорошо выполняются в Хе на участке кривой $N = N_{\kappa}(T)$, приведенной на рис. 16. Наиболее важное из них — первое неравенство — можно переписать в виде $l \ll \lambda_{\beta}$, где l — длина свободного пробега. Если она меньше длины волны, то, согласно Мотту⁴, это свидетельствует о локализации.

В^{43, 70} были предложены экспериментальные пути обнаружения кластеров. Наблюдение скачка подвижности при $N \gtrsim N_{\kappa}$ аналогично наблюдаемому в плотном гелии при образовании пузырьков, позволяет определить $N_{\kappa}(T)$ *). Наличие кластеров приводит при $N \gg N_{\kappa}$ к появлению полосы поглощения инфракрасного излучения в области совершенной прозрачности газа, которая связана с фотоионизацией кластеров. Эта полоса лежит в области частот $\nu \approx \epsilon/\hbar \approx 1500 \text{ см}^{-1}$, и ее измерение позволит определить энергию связи электрона в кластере. При $N > N_{\kappa}$ подвижность инжектированных электронов очень мала. Облучение газа источником света частоты порядка ν приводит к фотоионизации и резкому скачку подвижности. Такой эксперимент, проведенный в жидком He^4 ⁹¹, позволил определить энергию связи электрона ϵ в пузырьке. Аналогичный эксперимент может быть поставлен для определения свойств кластеров.

Электронные кластеры большого радиуса могут существовать и в других газах, в том числе и в молекулярных газах. Так, например, в неопентане ($\text{C}(\text{CH}_3)_4$), молекулы которого симметричны и обладают большой поляризуемостью, область существования кластеров близка к найденной в Хе. Ниже будет обсуждаться возможность образования кластеров в газах дипольных молекул. С другой стороны, в газах, атомы которых обладают малой поляризуемостью (например, Аг, метан — CH_4), несмотря на то, что длина рассеяния отрицательна, образование кластеров невыгодно.

2) Ф л у к т у о н ы м а л о г о р а д и у с а. Кроме кластеров большого радиуса, в плотных газах могут существовать комплексы малого радиуса. Тенденцию к их образованию можно проследить на рис. 15. С уменьшением λ ход ΔF претерпевает новое качественное изменение (кривая 3, соответствующая большому N/T), проходя через второй максимум и далее падая неограниченно. Однако учет отталкивания атомов внутри флуктуона может стабилизировать комплекс так, как это указано пунктиром на рис. 15. Тогда комплексы малого радиуса существуют наряду с большими кластерами, причем их концентрации относятся как

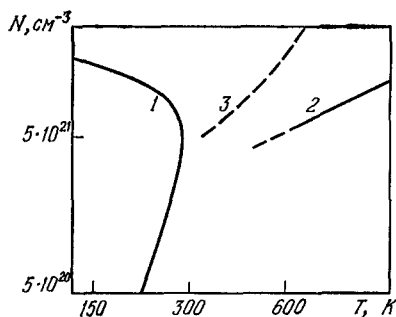


Рис. 16. Значение плотности N_{κ} , при котором происходит локализация электронов в Хе (2), кривая сосуществования фаз газ — жидкость (1) и кривая, соответствующая $N B(T) = 1$.

$B(T)$ — второй вириальный коэффициент взаимодействия между атомами.

*) Недавно в работе^{123б} при измерении скорости дрейфа электронов в плотном газообразном ксеноне вблизи кривой сосуществования фаз «газ — жидкость» было обнаружено заметное уменьшение подвижности электронов, которое, по-видимому, свидетельствует об автолокализации электронов с образованием кластеров.

$\exp [-\beta (\Delta F_m - \Delta F_0)]$, где ΔF_m и ΔF_0 — значения ΔF в соответствующих минимумах кривой $\Delta F(\lambda)$.

При низких температурах в состоянии термодинамического равновесия большая часть электронов локализуется в комплексы малого радиуса⁴³. Однако и при низких температурах зарождение флуктуонов происходит на мелких гауссовых флуктуациях большого радиуса (см. гл. 2, б)), что приводит сначала к образованию кластеров большого радиуса. Они отделены энергетическим барьером от комплексов малого радиуса и могут обладать значительным временем жизни. В реальных экспериментах это время может оказаться сравнимым с характерным временем измерений. Тогда комплексы малого радиуса наблюдаться не будут.

Свойства флуктуонов малого радиуса значительно отличаются от свойств больших кластеров. В этом проще всего убедиться с помощью модели прямоугольной ямы. Предположим, что возможна локализация электрона в флуктуоне сферической формы радиуса R с прямоугольными стенками, плотность атомов внутри которого N_1 отличается от средней N на величину ΔN ($N_1 = N + \Delta N$). Обычно поле, действующее на электрон, в флуктуоне принимается равным $2\pi\hbar^2 L \Delta N / m$. Однако в случае значительной поляризуемости атомов α необходимо учесть, что длина рассеяния L — интегральная характеристика потенциала $V(r)$, причем вклад в нее дают все расстояния вплоть до бесконечности. С другой стороны, волновая функция локализованного электрона экспоненциально затухает на расстояниях, больших R . Таким образом, мы должны из величины L исключить вклад, который в нее давали расстояния $r > R$. Это эквивалентно введению дополнительного поля, равного $4\pi\Delta N \int_R^\infty V(r) r^2 dr = 2\pi\alpha e^2 \Delta N / R$. Тогда, считая потенциальную яму достаточно глубокой, для энергии связи электрона в флуктуоне ε можно записать

$$\varepsilon(R) = -\frac{2\pi\hbar^2 L \Delta N}{m} - \frac{2\pi\alpha e^2 \Delta N}{R} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2}.$$

Как обычно, изменение свободной энергии вследствие локализации электрона в флуктуоне $\Delta F = -\varepsilon + T\Delta S$, где $\Delta S(R) = (4\pi/3) R^3 [N_1 \times \ln(N_1/N) - \Delta N]$. Из условия минимума можно найти концентрацию атомов внутри флуктуона

$$N_1(R) = N \exp \left[-\frac{3\lambda_\beta^3}{R^3} \left(L + \frac{\alpha}{a_0 R} \right) \right]. \quad (2.41)$$

Из (2.41) следует, что при $L < 0$ флуктуоны большого радиуса ($R > |L| a_0 / \alpha$) представляют собой кластеры ($N_1 > N$), а флуктуоны малого радиуса ($R < |L| a_0 / \alpha$) скорее являются пузырьками ($N_1 < N$). В промежуточной области, по-видимому, существуют образования смешанного типа, представляющие собой полость, окруженную сгущением атомов. Полость образуется вследствие короткодействующего обменного отталкивания между электроном и атомами, а сгущение — вследствие поляризационного притяжения.

В случае мелких кластеров оптимальный размер R_m и зависимость $N_\kappa(T)$ даются выражениями, с точностью до константы совпадающими с (2.37) и (2.38). На линии перехода в локализованные состояния $N_\kappa(T)$

$$N_1(R_\kappa) = N \exp \left(\frac{2}{27} \frac{\lambda_\beta^3 L^4 a_0^3}{\alpha^3} \right). \quad (2.42)$$

Из (2.42) следует, что при высоких температурах $N_1 \simeq N$, справедливо гауссово приближение и взаимодействием между атомами в кластере

можно пренебречь. С понижением температуры N_1 растет, и учет этого взаимодействия становится важен. Естественно, что для флуктуонов малого радиуса учет межатомного отталкивания обязателен.

Наиболее просто роль межатомного отталкивания можно проследить с помощью приближения решеточного газа, оставаясь в рамках модели прямоугольной ямы. В этом случае изменение энтропии равно (см. (2.23))

$$\Delta S(R) = \frac{4\pi}{3} R^3 \left(N_1 \ln \frac{N_1}{N} - \frac{1-N_1 b}{b} \ln \frac{1-N_1 b}{1-Nb} \right). \quad (2.43)$$

Минимизируя ΔF по N_1 , вместо (2.41) получаем

$$N_1(R) = \frac{N \exp(-3\lambda_\beta^2 L^*/R^3)}{1-Nb [1-\exp(-3\lambda_\beta^2 L^*/R^3)]}, \quad L^* = L + \frac{\alpha}{a_0 R}, \quad (2.44)$$

а $\Delta F(R)$ имеет вид

$$\beta \Delta F = \frac{\pi^2 \lambda_\beta^2}{R^2} - 4\pi N \lambda_\beta^2 L^* + \frac{4\pi}{3} \frac{R^3}{b} \ln \left\{ 1 - Nb \left[1 - \exp \left(-\frac{3\lambda_\beta^2 L^*}{R^3} \right) \right] \right\}. \quad (2.45)$$

При больших плотностях ($Nb \rightarrow 1$) $\beta \Delta F \approx \pi^2 \lambda_\beta^2 / R^2$, т. е. учет отталкивания действительно приводит к появлению второго минимума $\Delta F(R)$ и устранению ее нефизического поведения при малых R . Из условий $\partial \Delta F / \partial R$ и $\Delta F = 0$ можно определить условия возникновения и свойства кластеров малого радиуса. Получающиеся выражения довольно громоздки и здесь приводиться не будут.

3) К о р р е к т н ы й у ч е т п о л я р и з а ц и о н н о г о и м е ж а т о м н о г о в з а и м о д е й с т в и я . Сравнение с экспериментом. Изложенная в предыдущем разделе простая модель указывает на важность учета поляризационного взаимодействия и предсказывает существование новых квазичастиц-кластеров. Однако сделанные предположения позволяют рассматривать полученные результаты лишь как качественные. В работе ⁴³ методом самосогласованного поля произведен корректный учет поляризационного взаимодействия в случае флуктуаций произвольной глубины и формы, и, наряду с отталкиванием, учтено притяжение между атомами газа. Применительно к легким инертным газам это позволило выяснить влияние поляризационного взаимодействия на свойства пузырьков в He и H₂.

В методе самосогласованного поля изменение свободной энергии системы вследствие локализации электрона как с образованием пузырька, так и с образованием кластера определяется выражением (2.7), в котором эффективный потенциал $\tilde{V}(\mathbf{r})$ равен

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \int V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r}'. \quad (2.46)$$

В ⁴³ показано, что если длина волны электрона λ в кластере или пузырьке достаточно велика, т. е.

$$\lambda^2 \gg \frac{\alpha}{a_0}, \quad \lambda \gg |L|,$$

то $\tilde{V}(\mathbf{r})$ можно записать в виде

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = 4\pi \frac{\hbar^2 L}{2m} |\psi(\mathbf{r})|^2 - \frac{\alpha e^2}{2} \int \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2 - |\psi(\mathbf{r})|^2}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^4} d\mathbf{r}'. \quad (2.47)$$

Отметим, что это выражение не содержит расхождений при $r \rightarrow 0$, а вся информация о потенциале взаимодействия содержится в хорошо известных характеристиках — длине рассеяния L и поляризуемости α . Этот факт находится в непосредственной связи с теорией рассеяния медленных электронов на атомах ^{18a, 2}, выражающей амплитуду рассеяния лишь через L и α .

Учет межатомного взаимодействия в ⁴³ осуществлен в парном приближении в рамках модели решеточного газа ⁶. Расчет производится с пробной волновой функцией (2.10). На рис. 17 приведены результаты численного расчета $\Delta F(\lambda)$ в Хе для трех значений T при плотностях, когда $\Delta F_0 = 0$, т. е. когда число свободных электронов равно числу электронов, локализованных в кластерах большого радиуса. Из рис. 17 следует,

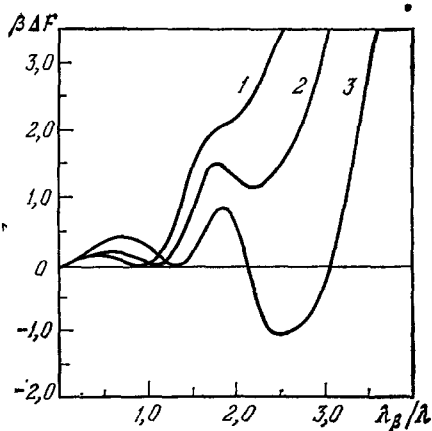


Рис. 17. Зависимость $\beta \Delta F$ от величины λ_B / λ в Хе ⁴³.

Приведены кривые, для которых $\Delta F_0 = 0$: 1 — $T = 700$ К, $N = 2.5 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 2 — $T = 600$ К, $N = 1.9 \cdot 10^{21}$ см⁻³; 3 — $T = 500$ К, $N = 1.3 \cdot 10^{21}$ см⁻³.

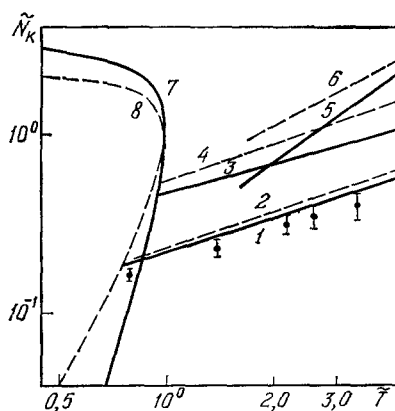


Рис. 18. Значение приведенной плотности $\tilde{N}_K(\tilde{T}) = N_K(T)/N_c$, при которой происходит локализация электронов ⁶⁹ — кривые 1—6.

Для He⁴ — кривые 1, 2, для H₂ — 3, 4 (кривые 2, 4 — без учета поляризационного взаимодействия), для Хе — 5, 6 (6 — гауссово приближение с учетом взаимодействия между атомами), 7, 8 — кривые сосуществования фаз соответственно в Хе и He⁴. Значки — экспериментальные значения N_K в He⁴ ²³.

$$(\tilde{T} = T/T_c).$$

что при высоких температурах кластеры малого радиуса отсутствуют (кривая 1). С понижением температуры они появляются и могут даже преобладать (кривая 3). Результаты расчета $\tilde{N}_K(T)$ для Хе приведены на рис. 18.

В газах, где электрон преимущественно отталкивается от атомов ($L > 0$), учет поляризуемости также может давать заметные поправки. На рис. 18 построена зависимость $N_K(T)$ в He⁴ и H₂ с учетом поляризационного взаимодействия и без него. Видно, что его учет приводит к уменьшению N_K , причем к тем большему, чем выше температура. В Хе поправка, связанная с этим эффектом, мала ввиду малости α . В H₂ учет поляризационного взаимодействия уменьшает N_K на 20—50%. На рис. 18 приведены также значения N_K , полученные в экспериментах по подвижности электронов в He⁴ ²³.

На рис. 18 хорошо видно, что зависимость $N_K(T)$ для He⁴ и H₂ качественно иная, чем в Хе. В самом деле, согласно (2.5) в случае пузырьков $N_K \sim T^{2/3}$, а для кластеров из (2.38) следует $N_K \sim T$.

4) Ориентационные кластеры в газе дипольных молекул. В среде полярных молекул локализация может быть обусловлена не столько сгущением (или разрежением) плотности вокруг заряда, сколько преимущественной ориентацией диполей на заряд. Это является следствием отсутствия центральной симметрии потенциала взаимодействия электрон — молекула

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{(\mathbf{d}\mathbf{r})}{r^3}, \quad (2.48)$$

где \mathbf{d} — дипольный момент молекулы. Такой ориентационный кластер подобен гидратированному или сольватированному электрону, которые хорошо изучены экспериментально и теоретически¹²⁴⁻¹²⁶. Однако условия в газе благоприятно отличаются от условий в полярных жидкостях. В более разреженной системе отпадает целый ряд трудностей, которые в жидкостях связаны в основном с учетом короткодействующей компоненты потенциала $V(\mathbf{r})$. Это позволяет в отсутствие экспериментальных данных указать область, в которой существование таких состояний возможно¹²⁷.

По аналогии с задачей о состоянии электрона в сильно поляризуемых газах можно предположить, что электрон может локализоваться при малых отклонениях энергии взаимодействия от средней. Тогда для вычисления ΔF можно воспользоваться формулой (2.33), в которую введем структурный фактор $S(\mathbf{k})$ с тем, чтобы учесть взаимодействие между молекулами газа. Тогда

$$\Delta F\{\psi\} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \mathbf{k}^2 \psi^2(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} - \frac{1}{2} \beta N \int |\tilde{V}(\mathbf{k})|^2 S(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (2.49)$$

$$S(\mathbf{k}) = 1 + N \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} [g(\mathbf{R}) - 1] d\mathbf{R} + N \int [g(\mathbf{R}) - 1] d\mathbf{R}, \quad (2.50)$$

$g(R)$ — бинарная корреляционная функция молекул. Вклад в ΔF дает взаимодействие между молекулами, составляющими избыточную плотность над средней (второе слагаемое в (2.50)), взаимодействие между ними и однородным фоном (третье слагаемое). Явная зависимость S от \mathbf{k} определяется неоднородностью среды, возникающей в результате кластеризации.

Межмолекулярное взаимодействие в умеренно плотном газе можно описывать в парном приближении. Межмолекулярный потенциал $u(\mathbf{R})$ имеет короткодействующую отталкивательную изотропную составляющую и дальнодействующую диполь-дипольную

$$u_L(\mathbf{R}) = \frac{(\mathbf{d}_1\mathbf{d}_2) - 3(\mathbf{d}_1\mathbf{R})(\mathbf{d}_2\mathbf{R})R^{-2}}{R^3}. \quad (2.51)$$

Так как $u_L(\mathbf{R})$ зависит от взаимной ориентации диполей \mathbf{d}_1 , \mathbf{d}_2 , то по ней следует провести усреднение ΔF , что далее и будет сделано. Взаимодействие (2.51) в однородном газе является притягивающим, а в среде ориентированных диполей — отталкивательным¹²⁶.

Ограничимся случаем высоких температур, когда $\beta |u_L(R)| \ll 1$. Тогда структурный фактор имеет вид

$$S(\mathbf{k}) \approx 1 - 2Nb - \beta u_L(\mathbf{k}) - 2NB(T),$$

где $u_L(\mathbf{k}) = 4\pi(\mathbf{k}\mathbf{d}_1)(\mathbf{k}\mathbf{d}_2)/k^2$ — фурье-образ (2.51), b — учетверенный собственный «объем» молекулы, $B(T)$ — второй вириальный коэффициент.

В адиабатическом приближении, когда характерные электронные времена много меньше времен пространственного перемещения и времен

переориентации диполей в области локализации, волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ должна быть сферически симметричной. В этом случае $\tilde{V}(\mathbf{R})$ равен

$$\tilde{V}(\mathbf{R}) = -\cos(\mathbf{dR}) \frac{ed}{R^2} \int_0^R |\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr. \quad (2.52)$$

Минимум $\Delta F\{\psi\}$ найдем вариационным методом с использованием пробной функции (2.15). Получаем

$$\Delta F\{\psi\} = \Delta F(\lambda) = \frac{3}{4} \lambda^{-2} - \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2\pi}}{9} N d^2 \lambda_\beta^3 \lambda^{-1} \left(1 - 2Nb - 2NB - \frac{4\pi N d^2 \beta}{3} \right); \quad (2.53)$$

здесь и ниже все величины выражены в атомных единицах. Варьирование по λ дает

$$\beta \Delta F(\lambda_0) = -\frac{3}{2} \left(\frac{\lambda_\beta}{\lambda_0} \right)^2, \quad (2.54)$$

$$\lambda_0^{-1} = \frac{8}{9} \frac{\sqrt{2\pi}}{9} N \lambda_\beta^3 d^2 \left(1 - 2NB - 2Nb - \frac{4\pi}{3} N d^2 \beta \right),$$

λ_0 — длина волны локализованного электрона. Межмолекулярное взаимодействие увеличивает размер кластера, препятствуя его образованию. Однако в первом приближении $\lambda_0^{-1} = N \lambda_\beta^3 d^2$. Это позволяет переписать условие преобладания локализованных состояний над свободными $\beta |\Delta F(\lambda_0)| \gtrsim 1$ в иной форме:

$$Nq\lambda_\beta \gtrsim 1, \quad q = \frac{8\pi \lambda_\beta^3 d^2}{3}. \quad (2.55)$$

Критерий (2.55) аналогичен критерию (2.40), q — борновское сечение рассеяния электрона на диполе.

Распределение избыточных молекул в кластере $n(\mathbf{R}, \Omega)$ по координатам \mathbf{R} и ориентациям (Ω — угол между \mathbf{d} и \mathbf{R}) дается формулой Больцмана

$$n(\mathbf{R}, \Omega) = N(e^{-\beta \tilde{V}(\mathbf{R})} - 1). \quad (2.56)$$

Существенно, что в рассматриваемом приближении $n(\mathbf{R}, \Omega) = -\beta NV(\mathbf{R})$. Поэтому сгущение вокруг электрона отсутствует, $n(R) = \int n(\mathbf{R}, \Omega) d\Omega/4\pi = 0$. Состояния являются чисто ориентационными.

Они близки к поляронам большого радиуса. Однако в отличие от полярона автолокализованное состояние электрона в неупорядоченной среде локализовано почти что в буквальном смысле, поскольку подвижность этой массивной частицы чрезвычайно низка

Напомним, что полученные выражения применимы, если $\beta |\tilde{V}(\mathbf{R})| \ll \ll 1$ (глубина (2.52) пропорциональна $d \cos(\mathbf{dR})/\lambda^2$ и $N\lambda_\beta^3 \gg 1$). Эти неравенства совместимы с (2.55), если

$$N\lambda_\beta^3 d^2 \gtrsim 1, \quad d \ll 1. \quad (2.57)$$

Естественно, что область применимости ограничена малыми дипольными моментами d . Это, казалось бы, не позволяет применить теорию к парам воды, поскольку в них $d = 0,725$, т. е. не является малым. Однако в буквенных неравенствах (2.57) содержатся малые численные множители. Это позволяет с помощью полученных выражений указать границу локали-

зации $N_k(T)$ на диаграмме плотность — температура. На рис. 19 кривая 2 — $N_k(T)$. На кривой 2 при температуре $T = 1000$ К кластеры содержат большое число молекул $(4\pi/3) N r_0^3 \approx 50$, где r_0 — «радиус» кластера, определяемый из условия $(4\pi/3) r_0^3 |\psi(0)|^2 = 1$. Взаимное отталкивание диполей приводит к более крутому ходу $N_k(T)$.

Локализованные состояния электронов в воде были найдены в ^{128a}. Главным образом исследовалась область жидкости, но измерения были проведены и при $T > T_c$ вплоть до $T = 390$ С при $\rho \approx \rho_c$. Измерялся спектр поглощения воды при инъекции в нее электронов. Как и при исследованиях в жидкой среде при закритических температурах имела полоса поглощения, соответствующая переходу электрона из основного состояния флукугона в непрерывный спектр. Максимум поглощения наблюдался при энергии квантов света ≈ 1 эВ. Как следует из рис. 19, уровень плотности ρ_c значительно удален от кривой кластеризации 2. Поэтому приближение мелких протяженных флуктуаций становится неприменимым. Наоборот, следует ожидать плотных скоплений вокруг электрона. Такие состояния рассмотрены в работе ^{128б}, результаты которой хорошо согласуются с экспериментальными данными ^{128a, б}. В ^{128в} измерения спектра поглощения были проведены на линии насыщенных паров.

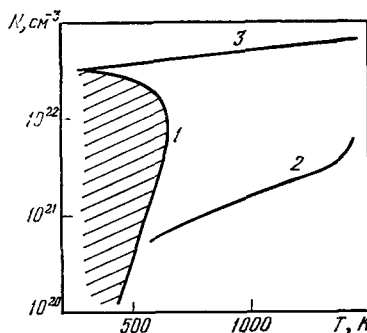


Рис. 19. Диаграмма плотность — температура воды. 1, 3 — кривые фазового равновесия, кривая 2 — $N_k(T)$.

г) Позитронные кластеры.

К р и т и ч е с к а я т о ч к а я в л е н и я к л а с т е р и з а ц и и

В экспериментах по аннигиляции позитронов в плотном газообразном He^4 при низких температурах было обнаружено необычное поведение скорости аннигиляции позитронов λ_1 ^{71, 72}. При высоких температурах λ_1 , как обычно, не зависит от T и пропорциональна плотности газа N (см. ниже, рис. 20). При некоторой «критической» температуре T_k λ_1 скачкообразно возрастает и достигает значений, характерных для жидкого He^4 . Такое увеличение скорости аннигиляции естественно связать с повышением плотности атомов вокруг позитрона — либо в результате химической связи, либо благодаря поляризации среды и образованию позитронных кластеров, аналогичных электронным, обсуждавшимся в предыдущем разделе. Эта аналогия становится более очевидной, если учесть, что длина рассеяния позитронов на атомах отрицательна, т. е., как и в случае электронов, в тяжелых инертных газах преобладают силы притяжения.

Связанные состояния позитрона с атомами He^4 , находящимися в основном состоянии, по-видимому, отсутствуют ¹²⁹. В ⁴⁶ обсуждается вторая возможность. Исходя, по существу, из модели Аткинса ¹³⁰, справедливой для тяжелых классических ионов, авторы ⁴⁶ выполнили оценки, не подтвердившие возможность образования кластеров в He^4 . Тем самым вопрос о природе кластеров как в гелии, так и в аргоне ¹⁰⁶, оставался открытым. Возможность образования позитронных кластеров в плотных газах показана в работе ⁷³. Причем область существования кластеров оказалась ограниченной не только со стороны низких плотностей, но и со стороны высоких и примыкает к кривой сосуществования фаз «газ — жидкость» со стороны более высоких температур. Это позволило предсказать существование «критической» температуры для явления кластериза-

ции позитронов, выше которой кластеры отсутствуют. В последнее время «критическая» точка кластеризации была обнаружена в He^4 и He^3 ^{74a}.

1) Позитронные кластеры и аннигиляция медленных позитронов. Все основные эффекты, наблюдаемые при измерении скорости аннигиляции медленных позитронов, вытекают из простой модели:

1) взаимодействие e^+ с атомом описывается псевдопотенциалом Ферми с длиной рассеяния L (1.3);

2) для изменения энтропии ΔS используется приближение решетчатого газа с учетом как межатомного отталкивания, так и притяжения;

3) e^+ локализуется в сферическом объеме радиуса R , равномерно заполненном атомами с максимально возможной плотностью, равной $1/b$.

Для этой модели

$$\beta \Delta F = \pi^2 \lambda_\beta^3 R^2 + 4\pi L \lambda_\beta^3 \Delta N + \frac{4\pi}{3} R^3 \left[b^{-1} \ln \frac{1}{1 - \Delta N b} - a (\Delta N)^2 \right]. \quad (2.58)$$

Первое слагаемое в (2.58) — кинетическая энергия e^+ , второе — потенциальная, $\Delta N = b^{-1} - N$ — избыточная плотность атомов в кластере, $a = T_c/N_c$, $b = 1/2N_c$.

Область, где большая часть позитронов локализована, ограничена кривой $N_K(T_K)$, определяемой системой уравнений: $\Delta F = 0$, $\partial \Delta F / \partial R = 0$. Решая ее, получаем $N_K(T_K)$ (или $T_K(N_K)$) и размер оптимальных кластеров R_K :

$$\frac{T_K}{T_c} = - \frac{(1 - N_K b)^2}{\ln N_K b} \left[\frac{a}{b T_c} + c \frac{|L|^{5/2} \lambda_c^2}{b^{3/2}} \sqrt{1 - N_K b} \right], \quad (2.59)$$

$$R_K = \sqrt{\frac{5\pi}{12|L|} \left(\frac{1}{b} - N_K \right)^{-1}}, \quad (2.60)$$

где $c = 16(3/5)^{5/2} \pi^{-3/2}$, $\lambda_c = \hbar / \sqrt{2mT_c}$. Область существования кластеров ограничена, естественно, как со стороны низких N , так и со стороны высоких, поскольку ограничена сжимаемость вещества. Это следует также из формулы (2.59), имеющей два корня N_K при низких температурах. Два этих значения N_K с ростом температуры сближаются и, наконец, при $T_K = T^*$ равны друг другу. При температуре выше T^* уравнение (2.59) не имеет решения ни при каких N , т. е. при $T > T^*$ образование кластеров термодинамически невыгодно.

Итак, область существования кластеров, ограниченная кривой $N_K(T_K)$, примыкает к двухфазной области газа, имея «критическую» температуру $T^* > T_c$. С достаточной точностью

$$\frac{T^*}{T_c} \approx 0,41 \left(\frac{a}{b T_c} + 0,85 |L|^{5/2} \lambda_c^2 b^{-3/2} \right), \quad N^* \approx 0,28 b^{-1}. \quad (2.61)$$

Полученные результаты справедливы лишь для протяженных кластеров, число атомов в них должно быть велико, а их плотность близка к плотноупакованной. Это соответствует выполнению следующих неравенств:

$$|L| \ll R, \quad \left(\frac{4\pi}{3} \right) R^3 \frac{1}{b} \gg 1, \quad 1 - Nb \ll Nb \exp \left(\frac{3L\lambda_\beta^3}{R^3} + Nb - 1 \right). \quad (2.62)$$

Выполним оценки для Ag и Ne. Примем $L_{\text{Ag}} = -3,5a_0$ (согласно¹³¹ $-3 \geq L_{\text{Ag}} \geq -4a_0$), $L_{\text{Ne}} = -0,6a_0$ ¹³². Для Ag получаем $T^* \approx 1,6T_c$, т. е. имеется достаточно широкая область существования кластеров. Это находится в согласии с экспериментом¹⁰⁶, где при некоторых условиях обнаружено резкое увеличение скорости аннигиляции e^+ в Ag. В Ne T^*

практически совпадает с T_c , и, следовательно, кластеры могут существовать лишь в очень узкой области. И действительно, в 106 никаких аномалий скорости аннигиляции в Ne не наблюдалось.

На рис. 20 приведена зависимость $\lambda_1(T)$ в He^4 , измеренная в $^{72, 46}$ при трех различных плотностях. Видно, что при низких температурах λ_1 практически не зависит от N и T и имеет значения λ_L , характерные для жидкого He^4 (например, в жидком He^4 при давлении насыщенных паров $\lambda_1 \approx 5,0 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ при 4,2 К и $5,5 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ в λ -точке 46). При высоких температурах $\lambda_1 \ll \lambda_L$, не зависит от T , пропорционально N и имеет значения λ_G , характерные для всех газов при высоких температурах (см. формулу (1.15)). Температуру T_K естественно определить из условия, что

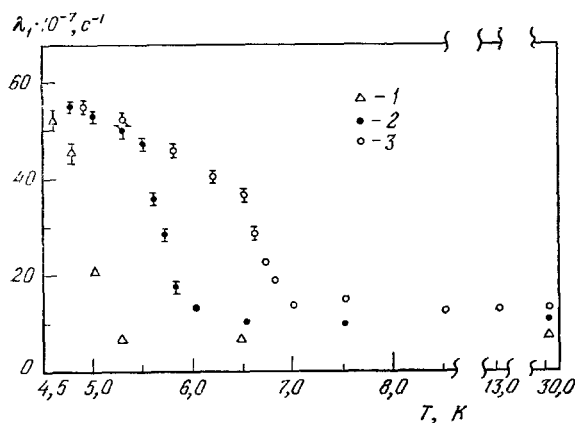


Рис. 20. Скорость аннигиляции позитронов в газообразном He^4 .
Плотность (г/см^3): 0,016 (1), 0,023 (2) и 0,030 (3).

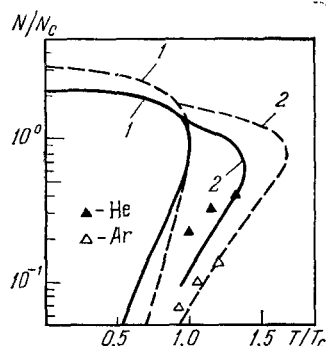


Рис. 21. Кривые сосуществования фаз (1) и кластеризации $N_K(T)$ (2).

Сплошные кривые — He^4 , штриховые — Ag, значки — эксперимент $^{46, 106}$.

при данной плотности N и $T = T_K$ позитрон может с равной вероятностью находиться как в свободном, так и в локализованном состоянии ($\lambda_1(T, N)|_{T=T_K} = [\lambda_G(N) + \lambda_L]/2$). Полученные таким образом значения $T_K(N)$ приведены на рис. 21. Там же приведены значения $T_K(N)$ для Ag, полученные аналогичной обработкой экспериментальных данных работы 106 .

Для количественного сопоставления с экспериментом в 73 были проведены численные расчеты с помощью метода самосогласованного поля, аналогично случаю электронных кластеров (см. предыдущий раздел и работу 43). Взаимодействие между атомами в кластере учитывалось в рамках ван-дер-ваальсовской модели с константами a и b , полученными обработкой эмпирического уравнения состояния в соответствующей области плотностей и температур. Результаты расчета для He^4 и Ag приведены на рис. 21. Внутри кривых $N_K(T)$ большая часть позитронов локализована, а скорость аннигиляции близка к жидкостной λ_L . Экспериментальные точки N_K , полученные в $^{46, 106}$, соответствуют низкотемпературной части нижней ветви кривой $N_K(T)$. В работе 73 было указано, что для определения критической точки кластеризации, необходимо расширить область изменения параметров прежде всего по температуре. Это было сделано в недавней работе 74a , которая обсуждается ниже.

Из приведенных кривых видно, что почти на всей верхней части кривой сосуществования фаз газ — жидкость (т. е. в жидкости) образо-

вание кластеров невыгодно, однако вблизи самой критической точки они могут существовать. Это хорошо согласуется с недавно обнаруженным резким увеличением λ_1 в жидком He^3 при $T = 3,05$ К, т. е. вблизи T_c^{133} , свидетельствующем о переходе позитронов в локализованное состояние. Что же касается жидкости, то вдали от T_c никаких аномалий в ходе λ_1 не обнаружено.

Укажем некоторые характеристики позитронных кластеров. В He^4 при $T = 7$ К они имеют размер $\sim 25a_0$ состоят из ~ 300 атомов, энергия связи составляет $\sim 0,1$ эВ. Плотность в кластере близка к $2,5 N_c$, т. е. соответствует плотности жидкости.

2) К р и т и ч е с к а я т о ч к а к л а с т е р и з а ц и и. Переход позитронов (электронов, позитрония) из свободного в локализованное состояние происходит резко, в узком интервале температур и может рассматриваться как размытый фазовый переход первого рода в позитронной подсистеме. С другой стороны, при образовании кластеров (пузырьков) вокруг легкой частицы возникает термодинамически устойчивая область повышенной (пониженной) плотности, которую можно считать участком новой фазы. Это делает инициированный легкими частицами переход подобным обычному фазовому переходу газ — жидкость, но реализуемому в микроскопических объемах. Эта аналогия наиболее ярко проявляется в случае позитронных кластеров, где форма кривой $N_k(T)$, ограничивающей область существования кластеров очень похожа на форму кривой сосуществования газ — жидкость, и обе они имеют критическую точку.

Наличие верхней ветви кривой $N_k(T)$ связано с тем, что с увеличением плотности возрастает межатомное взаимодействие. При этом сжимаемость газа резко уменьшается, а работа, которую необходимо затратить на создание флуктуации, возрастает. Локализация становится термодинамически невыгодна. Эти соображения справедливы не только в случае кластеров, но и пузырьков, для которых в принципе могла бы существовать аналогичная ветвь $N_k(T)$ и критическая точка. Однако между пузырьками и кластерами существует качественное различие. Оно состоит в том, что внутри пузырька плотность атомов мала и сжимаемость газа всегда близка к единице (даже если средняя плотность газа велика и его сжимаемость $\ll 1$). В кластерах же плотность атомов всегда больше средней и соответственно сжимаемость меньше средней. Поэтому, если в случае пузырьков верхняя ветвь $N_k(T)$ и существует, то она лежит значительно выше соответствующей ветви для кластеров. Количественные оценки, сделанные в ²⁸, показали, что образование электронных пузырьков в He^4 термодинамически выгодно вплоть до кривой плавления и, следовательно, верхняя ветвь $N_k(T)$ может лежать лишь в твердой фазе.

В работе ^{74a} была экспериментально определена область существования позитронных кластеров в He^4 и He^3 . Как и в ^{46, 72, 106} измерялась зависимость скорости аннигиляции позитронов от плотности при различных температурах, однако область изменения параметров как по плотности, так и по температуре была значительно расширена.

Полученная в ^{74a} кривая $N_k(T)$, ограничивающая область существования кластеров, качественно согласуется с предложенной в ⁷³ и подтверждает предсказанное в ⁷³ существование критической температуры T^* . Измеренные параметры критической точки микроскопического фазового перехода (He^4 : $T^* = 8,4$ К, $N^* = 10^{22}$ см⁻³; He^3 : $T^* = 6,6$ К, $N^* = 9 \cdot 10^{21}$ см⁻³) также неплохо согласуются с расчетом ⁷³. В работах ^{74b, в} в рамках модели, предложенной в ⁷³, был проведен анализ явления кластеризации позитронов. В частности, по известным значениям волновой функ-

ции локализованного позитрона и по формулам, аналогичным (2.17) и (2.18), была рассчитана скорость аннигиляции позитронов λ_1 . Результаты расчета для He^4 ^{74б} приведены на рис. 22, б. Они хорошо согласуются с экспериментом, показанным на рис. 22, а.

Полученная в ^{74а} информация о свойствах самих кластеров находится в согласии с оценками, сделанными в ⁷³. Так, размер кластеров оказался

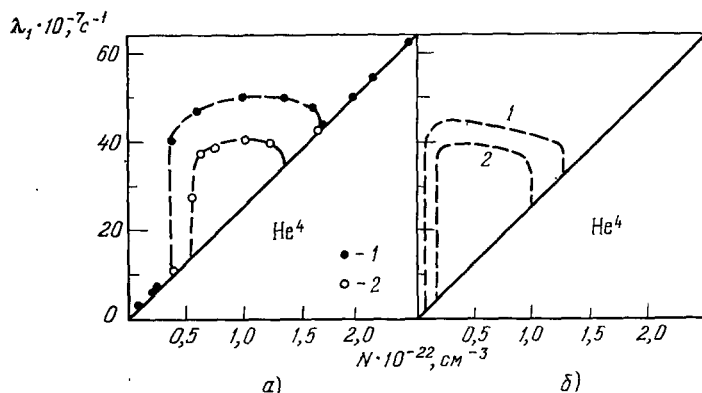


Рис. 22. Скорость аннигиляции λ_1 медленных позитронов в He^4 .

а) Эксперимент ^{74а,б}; б) теория ^{74б}.

равным 10–20 Å, а плотность атомов в кластере в 2–3 раза выше критической плотности газа N_c .

В других инертных газах в соответствии с (2.61) должны наблюдаться возрастающая последовательность T^*/T_c . В Ne оно минимально и в соответствии с этим в Ne вообще не обнаружено аномалии в скорости аннигиляции ¹⁰⁶. В Ar отношение T^*/T_c может быть измерено, если расширить диапазон измерений по температуре в ¹⁰⁶. Для тяжелых инертных газов (Kr, Xe) значение T^*/T_c должно быть большим, чем в Ar.

Область кластеризации электронов тоже должна быть ограничена по температуре. Это относится и к кластерам в Xe (гл. 2, в)). Величина T^*/T_c лежит где-то в районе 1000 К. Возможно, что критическая точка существует и для флукуонов в плотных парах воды.

3. О НЕКОТОРЫХ ПРИЛОЖЕНИЯХ

Рассмотренные выше явления интересны не только для экспериментальной физики, но и для многих конкретных приложений. Большая часть из них использует свойства системы во внешних полях. При этом вопросы кинетики в плотных системах, которые еще ждут своего решения, часто выступают на первый план. Чтобы еще раз подчеркнуть это и указать на нерешенные вопросы, рассмотрим некоторые из приложений.

а) Ионизационный коэффициент Таунсенда

Электроны, инжектированные в холодный газ, во внешнем электрическом поле F могут приобрести достаточную энергию для того, чтобы при столкновениях с атомами газа ионизовать их. В результате развивается электронная лавина, т. е. число электронов растет экспоненциально. Показатель экспоненты содержит величину α , называемую первым

ионизационным коэффициентом Таунсенда,

$$\alpha = \frac{\nu_i}{W} \quad (3.1)$$

где ν_i — средняя частота ионизации, W — скорость дрейфа. Известно, что величина $\eta = \alpha/F$ для данного газа зависит лишь от отношения F/N ¹³⁴.

Для ряда явлений, связанных с развитием ионизации, например для явления пробоя, величина α имеет первостепенное значение. Для разреженных газов значения α хорошо известны. Интерес к очень высоким

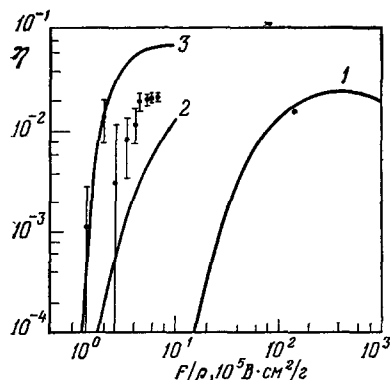


Рис. 23. Зависимость η от F/ρ . Значки — результаты измерений в Хе при плотности $\rho = 3,06$ г/см³ и $T = 163$ К ¹³⁵. Кривая 1 — эксперимент в разреженном газе, 2, 3 — расчет, выполненный в ¹³⁶.

сечение рассеяние электрона на атоме Хе q возрастает с энергией электрона как $\epsilon^{3/2}$ ¹³⁷, получаем из (3.1), что $\epsilon \sim (F^2/N^2S(0))^{1/5}$. Поскольку ϵ оказывается величиной порядка эВ, то выполняются сделанные неявно предположения. Во-первых, малы эффекты непарности при рассеянии (см. гл. 1,6)). Во-вторых, все электроны предполагались свободными, поскольку большие значения кинетической энергии препятствуют локализации (см. гл. 2).

Далее обратим внимание на то, что резкая зависимость η от F/N (рис. 23) обусловлена главным образом экспоненциальной зависимостью η от E_1/ϵ , где E_1 — энергия ионизации (остальные зависимости — степенные). Второй плотностной эффект обусловлен уменьшением E_1 вследствие сдвига границы непрерывного спектра

$$\Delta E_1 = E_1 - E_1(N) = -\frac{2\pi\hbar LN}{m} + \alpha e^2 N \int g(r) \frac{1}{2r^4} dr. \quad (3.3)$$

Этот сдвиг обусловлен взаимодействием электрон — атом (записан в оптическом приближении (2.27)) и взаимодействием ион — атом. Сдвиг основного состояния в определенных условиях тоже следует иметь в виду ¹³⁸. Таким образом, η экспоненциально зависит от $E_1(N) [N \sqrt{S(0)}/F]^{2/5}$, в то время как в разреженном газе он зависел от $E_1(N)/F^{2/5}$. Вследствие этого η в среде становится функцией.

$$\eta = \eta \left(\frac{F}{N \sqrt{S(0)}} \left[\frac{E_1}{E_1(N)} \right]^{2/5} \right)$$

— той же самой функцией, которая известна в разреженном газе, $\eta = (F/N)^{138}$.

плотностям стимулируется в настоящее время проблемой создания счетчиков, работающих на конденсированных средах. На рис. 23 представлены первые экспериментальные данные, полученные в жидком Хе ¹³⁵. Они демонстрируют радикальное отличие от универсальной кривой 1, полученной в разреженном газе.

Обсудим плотностные эффекты, влияющие на коэффициент Таунсенда ¹³⁶. Для определения энергии электронов ϵ в поле F запишем баланс их энергии, приравнявая упругие потери джоулеву нагреву:

$$\delta \epsilon \nu = eFW. \quad (3.2)$$

Здесь использованы обозначения гл. 1. Структурный фактор (1.14) в плотной среде может заметно отличаться от единицы и должен учитываться при записи скорости дрейфа $W = eF/m\nu S(0)$ ⁴¹. Учитывая, что

Полученный результат позволяет воспользоваться зависимостью $\eta (F/N)$ (кривая 1), сдвинув ее по оси абсцисс в соответствии с величинами $S(0)$ и $E_1(N)/E_1$. Таким образом построена кривая 2, качественно описывающая результаты измерений.

Реальная ситуация более сложна. Взаимодействие не только сдвигает границу непрерывного спектра, но и сильно изменяет спектр электронных состояний. Поэтому возникает вопрос о кинетике ионизации и возбуждения в плотной системе. Единственное, что пока можно утверждать, — это то, что потери энергии электронов в жидкости на возбуждение (с последующим высвечиванием) сильно уменьшаются. В самом деле, в дискретном спектре имеется всего один (или два) слабо связанный уровень экситонного типа. Кривая 3 на рис. 23 построена в пренебрежении каких-либо потерь, тем самым оценивая η сверху. Что же касается характера кинетики возбуждения и ионизации в плотном газе, он остается неясным.

б) Коронный разряд в криогенном гелии

В связи с разработкой высоковольтных сверхпроводящих систем (кабелей, магнитов) в последнее время большое внимание уделяется исследованию электрической прочности жидкого и плотного газообразного гелия^{139, 140}. Высокая электрическая прочность гелия в однородных электрических полях^{139, 141} указывает на возможность его использования не только как хладагента, но и в качестве хорошего изолятора. Для возможности выбора оптимальных условий работы конкретных систем важную роль играет изучение электрического разряда в условиях сильно неоднородного поля, например коронного разряда¹⁴². Это связано с тем, что при высоких напряженностях электрического поля пробой может инициироваться у микровыступов на поверхности электродов, где возможно появление локальной короны. Возникновение коронного разряда, с другой стороны, ответственно за основные потери энергии в линии (кабеле) при допробойных напряжениях. Теоретическое изучение коронного разряда и пробоя в криогенном гелии связано с большими трудностями, обусловленными отсутствием необходимой информации о кинетике процессов ионизации в плотных газах, о кинетике локализации, о пространственном распределении заряда (при наличии диффузии как свободных, так и локализованных электронов) и целом ряде неравновесных явлений, практически не изученных в плотных газах.

Коронный разряд в криогенном гелии исследовался Гончаровым и Левитовым¹⁴². При коронном разряде в межэлектродном промежутке имеется обычно протяженная сравнительно однородная область («шлейф короны»), в которой термализованные заряды дрейфуют во внешнем поле. Она наиболее доступна для рассмотрения. Обработка полученных вольт-амперных характеристик позволила оценить подвижности положительных и отрицательных зарядов. В жидком гелии подвижность электронов оказалась очень малой, соответствующей подвижности электронных пузырьков, а в закритическом гелии при изменении температуры или давления подвижность резко менялась от подвижности свободных электронов до подвижности пузырьков. Причем и абсолютные значения подвижности, и критические значения плотности, при которых происходило резкое изменение подвижности, хорошо совпадали с соответствующими величинами, полученными при времяпролетных экспериментах и обсуждавшимися в гл. 2, а). Это свидетельствует о важной роли локализованных электронных состояний в криогенных разрядах в гелии.

В очень сильных полях электроны нагреваются полем и система становится неравновесной. В каком-то смысле ситуация упрощается, если

нагрев электронов влечет за собою и разрушение локализованных состояний. Уровень средней энергии $\bar{\epsilon}$ в поле F может быть оценен, исходя из баланса энергии электрона. Приравнявая джоулев нагрев потерям при упругих столкновениях с атомами и считая сечение рассеяния электрона на атоме q не зависящим от энергии, а саму энергию электронов большой по сравнению с температурой газа, можно получить простое выражение для $\bar{\epsilon}$:

$$\bar{\epsilon} \approx \sqrt{\frac{M}{m}} eFl, \quad l = (Nq)^{-1}.$$

Если свободные электроны нагреты до энергии $\bar{\epsilon} \gg T$, то выигрыш энергии при переходе в связанное пузырьковое состояние не оказывается

по-прежнему равным $N\bar{V}$ (оценка по максимуму). Переходя в связанное состояние, горячий электрон должен потерять энергию $\bar{\epsilon}$, и если она выше $N\bar{V}$, то никакого выигрыша в энергии не возникает вообще. Следовательно, если $\bar{\epsilon} > N\bar{V}$, то существование пузырьков оказывается невыгодным. Оценим этот уровень F_1 , приравнявая $\bar{\epsilon} = N\bar{V}$. Получаем

$$F_1 \approx 8\pi^2 e N^2 L^3 a_0 \sqrt{\frac{m}{M}}.$$

В условиях, соответствующих началу локализации в гелии при $T = 4,2$ К величина $F_1 \approx 600$ В/см.

Высокие значения поля реализуются при явлении пробоя диэлектрических сред. Зависимость пробивного напряжения в гелии от температуры и давления исследовалась в работе ¹⁴². На рис. 24 приведена зависимость от температуры пробивного напряжения $U_{пр}$ отрицательной полярности при давлении 6 атм, которая имеет ярко выраженный максимум. Значение пробивного напряжения в окрестности максимума повышается в несколько раз, оставаясь все же значительно меньшим, чем в случае однородного поля ¹⁴¹. Причина возникновения максимума осталась невыясненной. Она, несомненно, связана с особенностями кинетики ионизации и рекомбинации в плотных средах, которые изучены еще недостаточно.

Рис. 24. Зависимость пробивного напряжения гелия от температуры.

1 — $U_{пр}$, неоднородное поле ¹⁴² (игла, $R = 0,01$ мм, — плоскость; расстояние между электродами $d = 9$ мм); 2 — $U_{пр}/10$, однородное поле ¹⁴¹ (сфера, $R = 11$ мм, — плоскость; приведенное расстояние между электродами $d = 9$ мм); $p = 6$ атм.

Рис. 24. Зависимость пробивного напряжения гелия от температуры. На графике по оси абсцисс отложена температура T в Кельвинах (4, 8, 12, 16), а по оси ординат — пробивное напряжение $U_{пр}$ в кВ (0, 20, 40, 60, 80). Кривая 1 (неоднородное поле) имеет выраженный пик, достигающий почти 90 кВ при $T \approx 7$ К. Кривая 2 (однородное поле) представляет собой более пологий спад с $U_{пр} \approx 50$ кВ при $T = 4$ К до $U_{пр} \approx 10$ кВ при $T = 16$ К.

в) Электропроводность неидеальной слабо ионизованной плазмы

В равновесной плазме электроны возникают не в результате инжекции, а при термической ионизации. Если степень ионизации мала, а плотность нейтральных атомов велика, то взаимодействие заряженных и нейтральных частиц может радикально влиять на некоторые свойства вещества.

Такова, например, плазма паров ртути и щелочных металлов при температуре в районе 2000 К и плотности порядка 10^{21} см $^{-3}$ ¹⁰.

Наиболее интересные эффекты состоят в том, что, во-первых, взаимодействие, понижая потенциал ионизации, приводит к росту электропроводности ^{143, 138, 144} и, во-вторых, часть электронов локализуется в кластерах ⁶⁹. Экспериментальные исследования ртутной и щелочной плазмы при $T \sim 2000$ К являются очень сложными. На наш взгляд, хорошей системой для исследования плотностных эффектов является плотный ксенон с малой присадкой легкоионизируемого Cs, который дает электроны.

Рис. 25 представляет собой диаграмму плотность — температура для этой системы. Показано, что к двухфазной области ксенона примыкает область кластеризации (гл. 1, в)). При высоких температурах даны расчетные линии равной проводимости $\sigma = 1$ и 10 Ом $^{-1}$ см $^{-1}$ при добавлении в ксенон 2% Cs. Обсудим подробнее рис. 25.

Сначала обратим внимание на то, что при больших плотностях проводимость σ с ростом N не убывает, как в разреженной плазме, а возрастает, достигая высоких значений. Это обусловлено большим значением величины ΔE_1 — снижения потенциала ионизации, $\beta \Delta E_1 \gg 1$. Эта величина вычисляется по формуле, аналогичной формуле (3.3), с учетом и других эффектов — образования ионов Cs_2^+ и XeCs^+ и сдвига основного уровня. Концентрация электронов

$$n \approx \sqrt{N} \lambda_\beta^{-3/2} \exp \left(-\frac{\beta E_1}{2} + \frac{\beta \Delta E_1}{2} \right)$$

при плотностях $N \gtrsim 10^{20}$ см $^{-3}$ возрастает с ростом N , что и обеспечивает высокие значения σ . Подвижность при высоких T определяется формулой (1.1). Наибольший интерес представили бы значения σ при меньших T . В области, примыкающей к N_K , резко нарастают поправки к подвижности, обсуждаемые в гл. 1, особенно интерференционная поправка (1.4). В области локализации определение σ становится очень сложным, поскольку требуется не только значение подвижности кластеров, но и корректное разделение коллектива электронов на электроны проводимости и на связанные в кластерах. Измерения σ в этой области и в примыкающих к ней областях могли бы пролить свет на эти сложные вопросы, общие для проблемы состояния электрона в плотных неупорядоченных системах.

Институт высоких температур
АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Мак-Даниель И. Процессы столкновений в ионизованных газах.— М.: Мир, 1967.
2. Смирнов Б. М. Физика слабоионизованного газа.— М.: Наука, 1972.
3. Гольданский В. И. Физическая химия позитрона и позитрония.— М.: Наука, 1968.
4. Мотт Н. Электроны в неупорядоченных структурах.— М.: Мир, 1969.
5. Лифшиц И. М. — ЖЭТФ, 1967, т. 53, с. 743.

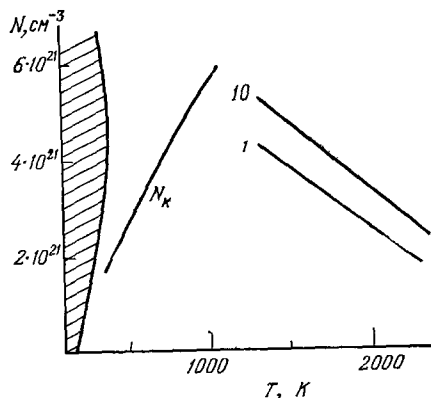


Рис. 25. Диаграмма плотность — температура для Xe.

Заштрихована двухфазная область; область кластеризации ограничена кривой N_K ; даны кривые равной проводимости $\sigma = 1$ и 10 Ом $^{-1}$ см $^{-1}$ при добавлении 2% Cs.

6. Кривоглаз М. А. — УФН, 1973, т. 111, с. 617.
7. Jortner J. — Ber. Bunsenges. phys. Chem., 1971, Bd. 75, S. 696.
8. Бонч-Бруевич В. Л. — В кн. Физика твердого тела. — М.: ВИНТИ, 1965, — С. 129. — Итоги науки.
9. Эфрос А. Л. — УФН, 1973, т. 111, с. 451.
10. Якубов И. Т. — В кн. Химия плазмы. — М.: Атомиздат, 1974. — Вып. 1, с. 120.
11. Halperin B. I., Lax M. — Phys. Rev., 1966, v. 148, p. 722.
12. Zittartz J., Langer J. S. — Ibid., p. 741.
13. Хастед Дж. Физика атомных столкновений. — М.: Мир, 1965.
14. Grunberg R. — Zs. Phys., 1967, v. 204, p. 12.
15. Grunberg R. — Zs. Naturforsch., 1967, Bd. 23a, S. 12.
16. Bartels A. — Phys. Lett. Ser. A, 1973, v. 44, p. 403.
17. Lehning H. — Ibid., 1969, v. 29, p. 719.
18. а) O'Malley T. F. — Phys. Rev., 1963, v. 130, p. 1020.
б) Schwartz K. W. — Phys. Rev. Lett., 1978, v. 41, p. 239.
19. Якубов И. Т. — ЖЭТФ, 1970, т. 30, с. 567.
20. Lekner J. — Phys. Rev. 1957, v. 158, p. 130.
21. Yakubov L. T., Roldughin V. I. — Phys. Lett. Ser. A, 1974, v. 49, p. 427.
22. Jahnke J. A., Holzwarth N. A. W., Rice S. A., — Phys. Rev. Ser. A, 1972, v. 5, p. 463.
23. Harrison H. R., Springett B. E. — Phys. Lett. Ser. A, 1971, v. 35, p. 73.
24. Jahnke J. A., Silver M. — Chem. Phys. Lett., 1973, v. 19, p. 231.
25. Bartels A. — Appl. Phys., 1975, v. 8, p. 59.
26. Jahnke J. A., Silver M., Hernandez J. P. — Phys. Rev. Ser. B, 1975, v. 12, p. 3420.
27. Harrison H. R., Springett B. E. — Chem. Phys., 1971, v. 10, p. 418.
28. Springett B. E., Jortner J., Cohen M. H. — J. Chem. Phys., 1968, v. 48, p. 2720.
29. Ferrell R. A. — Phys. Rev., 1957, v. 108, p. 167.
30. Smith J. B., McGervey J. D., Dahm A. J. — Ibid. Ser. B, 1977, v. 15, p. 1378.
31. Bartels A. — Phys. Lett. Ser. A, 1973, v. 45, p. 491.
32. Chistophorou L. G. — Intern J. Rad. Phys. and Chem. (R. L. Platzman memorial issue), 1975, v. 7, p. 205.
33. Huber B. — Zs. Naturforsch., 1969, Bd. 24a, S. 578.
34. Atrazhev V. M., Yakubov I. T. — J. Phys. Ser. D, 1977, v. 10, p. 2155.
35. Гинзбург В. Л., Гуревич А. В. — УФН, 1960, т. 70, с. 201.
36. Frommhold L. — Phys. Rev., 1968, v. 172, p. 118.
37. Палкина Л. А., Смирнов Б. М., Фирсов О. Б. — ЖЭТФ, 1972, т. 61, с. 2319.
38. Bartels A. — Phys. Rev. Lett., 1972, v. 28, p. 213.
39. Пятаевский Л. П. — ЖЭТФ, 1959, т. 37, с. 1794.
40. Lekner J. — Phys. Lett. Ser. A, 1968, v. 27, p. 341.
41. Cohen M. H., Lekner J. — Phys. Rev., 1967, v. 158, p. 305.
42. Mott N. F. — Adv. Phys., 1967, v. 16, p. 49.
43. Храпак А. Г., Якубов И. Т. — ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 2042.
44. Гольдманский В. И., Саясов Ю. С. — ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 1995.
45. Goldanskii V. I., Shantarovich V. P. — Appl. Phys., 1974, v. 3, p. 335.
46. Canter K. F., McNutt J. O., Roellig L. O. — Phys. Rev. Ser. A, 1975, v. 12, p. 375.
47. Roellig L. O., Kelly T. M. — Phys. Rev. Lett., 1967, v. 18, p. 387.
48. Fox R. A., Canter K. F., Fishbein M. — Phys. Rev. Ser. A, 1974, v. 15, p. 1340.
49. Coleman P. G., Griffith T. C., Heyland G. R., Killeen T. L. — Phys. Ser. B, 1975, v. 8, p. 1734.
50. Fraser P. A. — Adv. Atom. and Molec. Phys., 1968, v. 4, p. 63.
51. Canter K. F. — Contemp. Phys., 1972, v. 13, p. 457.
52. McNutt J. D., Summerour V. B., May A. D., Huang P. H. — J. Chem. Phys. 1975, v. 62, p. 1777.
53. Ландау Л. Д. Zs. Sowjetunion, 1933, Bd. 3, S. 664.
54. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. — М.: Гостехиздат, 1951.
55. Кривоглаз М. А. — ФТТ, 1969, т. 11, с. 2230.
56. Paul D. A. L., Graham R. L. — Phys. Rev., 1957, v. 106, p. 16.
57. Wackerle J., Stump R. — Ibid., p. 18.

58. Williams R. I.—*Can. J. Phys.*, 1957, v. 35, p. 135.
59. Careri G., Scaramuzi F., Thomson Y. O.—*Nuovo Cimento*, 1959, v. 13, p. 186.
60. Reif E., Meyer I.—*Phys. Rev.*, 1960, v. 119, p. 1164.
61. Kuper C. G.—*Ibid.*, 1961, v. 122, p. 1007.
62. Архипов Р. Г.—*УФН*, 1966, т. 88, с. 185.
63. Шикин В. Б.—*УФН*, 1977, т. 121, с. 457.
64. Hiroike K., Kestner N. R., Rice S. A., Jortner J.—*J. Chem. Phys.*, 1965, v. 43, p. 2625.
65. Springett B. E., Cohen M. H., Jortner J.—*Phys. Rev.*, 1967, v. 159, p. 183.
66. Гачечиладзе И. А., Кешишев К. О., Шальников А. И.—*Письма ЖЭТФ*, 1970, т. 12, с. 231.
67. Лебеденко В. Н., Родионов Б. У.—*Ibid.*, 1972, т. 16, с. 583.
68. Levine J., Sanders T. M.—*Phys. Rev. Lett.*, 1962, v. 8, p. 159.
69. Храпак А. Г., Якубов Н. Т.—*ЖЭТФ*, 1970, т. 59, с. 945.
70. Yakubov I. T., Khrapak A. G.—*Chem. Phys. Lett.*, 1970, v. 39, p. 160.
71. Roellig L. O., Kelly T. M.—*Phys. Rev. Lett.*, 1965, v. 15, p. 746.
72. Canter K. F., Roellig L. O.—*Ibid.*, 1970, v. 25, p. 328.
73. Храпак А. Г., Якубов Н. Т.—*Письма ЖЭТФ*, 1976, т. 23, с. 466.
74. а) Hautojarvi P., Rytola K., Tuovinen P., Vehanen A., Jauho P.—*Phys. Rev. Lett.*, 1977, v. 38, p. 842.
б) Manninen M., Hautojarvi P.—*Phys. Rev. Ser. B*, 1978, v. 17, p. 2129.
в) Stott M. J., Zaremba E.—*Phys. Rev. Lett.*, 1977, v. 38, p. 1493.
75. Harrison H. R., Sanders T. M., Springett B. E.—*J. Phys. Ser. B*, 1973, v. 6, p. 908.
76. Levine J., Sanders T. M.—*Phys. Rev.*, 1967, v. 154, p. 138.
77. Шикин В. Б., Ковдря Ю. З., Рыбалко А. С.—*ФКС (ФТИНТ АН УССР)*, 1971, т. 15, с. 99.
78. Храпак А. Г., Якубов Н. Т.—*ТВТ*, 1973, т. 11, с. 1115.
79. Хуанг К. *Статистическая механика*.—М.: Мир, 1966.
80. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика*.—М.: Физматгиз, 1963.
81. Кукушкин Л. С., Шикин В. Б.—*ЖЭТФ*, 1972 т. 63, с. 1830.
82. Hernandez J. P.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1973, v. 7, p. 1755.
83. Hernandez J. P.—*Ibid. Ser. B*, 1975, v. 11, p. 1289.
84. Лифшиц И. М.—*УФН*, 1964, т. 83, с. 617.
85. Лифшиц И. М., Гредескул С. А.—*ЖЭТФ*, 1969, т. 57, с. 2293.
86. Eggarter T. P., Cohen M. H.—*Phys. Rev. Lett.*, 1970, v. 25, p. 807.
87. Eggarter T. P., Cohen M. H.—*Ibid.*, 1971, v. 27, p. 129.
88. Hernandez J. P.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1972, v. 5, p. 635.
89. Eggarter T. P.—*Ibid.*, p. 2496.
90. Hernandez J. P., Ziman J. M.—*J. Phys. Ser. C*, 1973, v. 6, p. 1251.
91. Northby J. A., Sanders T. M.—*Phys. Rev. Lett.*, 1967, v. 18, p. 1184.
92. Fowler W. B., Dexter D. L.—*Phys. Rev.*, 1968, v. 176, p. 337.
93. DuVall B., Celli V.—*Ibid.*, 1969, v. 180, p. 276.
94. Фомин И. А.—*Письма ЖЭТФ*, 1967, т. 6, с. 715.
95. Young R. A.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1970, v. 2, p. 1983.
96. Schwarz K. W., Prasad B.—*Phys. Rev. Lett.*, 1976, v. 36, p. 878.
97. Legler W.—*Phys. Lett. Ser. A*, 1970, v. 31, p. 129.
98. Coopersmith M. H.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1971, v. 4, p. 295.
99. Dallacasa V.—*Phys. Lett. Ser. A*, 1976, v. 57, p. 245.
100. Gross E. P., Tung-Li H.—*Phys. Rev.*, 1968, v. 170, p. 190.
101. Celli V., Cohen M. N., Zuckerman M. J.—*Ibid.*, v. 173, p. 253.
102. Poitrenaud J., Williams E. L.—*Phys. Rev. Lett.*, 1972, v. 29, p. 1230.
103. Howell J., Silver M.—*Phys. Rev. Lett.*, 1975, v. 34, p. 921.
104. Френкель Я. И. *Кинетическая теория жидкости*.—Л.: Наука, Ленинград. отделение, 1975.
105. Yakubov I. T., Khrapak A. G.—*Appl. Phys.*, 1978, v. 16, p. 179.
106. Canter K. F., Roellig L. O.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1975, v. 12, p. 386.
107. Fishbein M., Canter K. F.—*Phys. Lett. A*, 1976, v. 55, p. 398.
108. Fraser P. A., Kraidy M.—*Proc. Phys. Soc.*, 1966, v. 89, p. 533.
109. Drachman R. J., Houston S. K.—*J. Phys. Ser. B*, 1970, v. 3, p. 1657.
110. Hernandez J. P.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1976, v. 14, p. 1579.
111. Briscoe C. V., Choi S.-I., Stewart A. T.—*Phys. Rev. Lett.*, 1968, v. 20, p. 493.
112. Smejtek P., Silver M., Dy K. S., Onn D. G.—*J. Chem. Phys.*, 1973, v. 59, p. 1374.

113. Onn D. G., Silver M.— Phys. Rev. Ser. A, 1971, v. 3, p. 1773.
114. Broomall J. R., Johnson W. D., Onn D. G.— Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 14, p. 2819.
115. Hernandez J. P., Silver M.— Phys. Rev. Ser. A, 1970, v. 2, p. 1949.
116. Miyakawa T., Dexter D. L.— Ibid., 1970, v. 1, p. 513.
117. Careri G., Gaeta F.— Nuovo Cimento, 1961, v. 20, p. 192.
118. Lenz W.— Zs. Phys., 1929, Bd. 56, S. 778.
119. Fetter A. L.— In: The Physic of Liquid and Solid Helium./Ed. Benneman K.H., Ketterson J. B.— J. Wiley, N. Y.; 1976.
120. Tankersley L. L.— J. Low. Temp. Phys., 1973, v. 2, p. 451.
121. Jortner J., Kestner N. R., Rice S. A., Cohen M. H.— J. Chem. Phys., 1965, v. 43, p. 2614.
122. Sommer W. T.— Phys. Rev. Lett., 1964, v. 12, p. 271.
123. а) Woolf M. A., Rayfield G. W.— Ibid., 1965, v. 15, p. 235.
б) Huang S.S.-S., Freeman G. R.— J. Chem. Phys., 1978, v. 68, p. 1355.
124. Харт Э., Анбар М. Гидратированный электрон.— М.: Атомиздат, 1973.
125. Jortner J., Cohen M. H.— Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 12, p. 1548.
126. Copeland D. A., Kestner N. R., Jortner J.— J. Chem. Phys., 1970, v. 53, p. 1189.
127. Ветчинин С. П., Якубов И. Т.— ТВТ, 1977, т. 15, с. 253.
128. а) Michael B. D., Hart E. J., Schmidt K. H.— J. Phys. Chem., 1971, v. 75, p. 2798.
б) Ветчинин С. П.— Электрохимия, 1979, т. 15, с. 421.
в) Gaaton A., Czapski G., Jortner J.— J. Chem. Phys., 1973, v. 58, p. 2648.
129. Gertter F. H., Snodgrass H. B., Spruch L.— Phys. Rev., 1965, v. 172, p. 110.
130. Atkins K. R.— Ibid., 1959, v. 116, p. 1339.
131. Nara S., Fraser P. A.— J. Phys. Ser. B, 1975, v. 8, p. 219.
132. Bransden B. H., Hutt P. K.— Ibid., p. 603.
133. Hautajarvi P., Rytola K., Tuovinen P., Jauho P.— In: Conference on Positron Annihilation.— Helsing, Denmark: 1976.— Paper No. E6.
134. Лозанский Э. Д., Фирсов О. Б. Теория искры.— М.: Атомиздат, 1975.
135. Derenzo S. E., Mast T. S., Zaklad H.— Phys. Rev. Ser. A, 1974, v. 9, p. 2582.
136. Atrazhev V. M., Yakubov I. T., Roldughin V. I.— J. Phys. Ser. D, 1976, v. 9, p. 1735.
137. Kieffer L. T.— In: JILA Inform. Center, Rept. No. 13.— Univ. of Colorado, Boulder, 1973.
138. Смирнов Б. М.— ДАН СССР, 1970, т. 195, с. 75.
139. Gerhold J.— Cryogenics, 1972, v. 12, p. 370.
140. Исследования высоковольтной изоляции при криогенных температурах. Сб. статей. Вып. 22— М.: ЭНИН, 1975.
141. Виноградов А. А., Гостев С. Г., Левитов В. И.— Цитир. в ¹⁴⁰, с. 18.
142. Гончаров В. А., Левитов В. И.— Ibid., с. 30.
143. Vedenov A. A.— In: Proc. of Intern. Conference on Quissent Plasmas.— Frascati, Italy: 1967.
144. Храпак А. Г., Якубов И. Т.— ТВТ, 1971, т. 9, с. 1139.