

УДК 533.9

Флуктуационный подход к описанию неидеальной плазмы. Часть I. Равновесная плазма

А. В. Ланкин, Г. Э. Норман

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Дано описание структуры энергетического спектра электронов в неидеальной плазме в рамках метода молекулярной динамики. Выделены парные флуктуации. Рассмотрен переход парных флуктуаций в пределе малых степеней неидеальности плазмы в возбужденные атомы. Оценены области существования возбужденных атомов и парных флуктуаций. Выяснен характер ограничения статистической суммы атома в неидеальной плазме. Получены указания на существование мягкой щели в энергетическом спектре электронов в плазме.

PACS: 52.25.-b

Введение

Изучение электронной подсистемы представляет собой задачу, важную для описания как термодинамических, так и кинетических параметров неидеальной плазмы. Наиболее сложную проблему при этом представляет собой область, пограничная между связанными (возбужденными атомами) и свободными состояниями [1, 2]. Проблема, связанная с описанием электронного спектра в этой области, возникла достаточно давно [1—14]. История вопроса приводит к работам М. Планка [15], Е. Ферми [16] и Л. Бриллюэна [17]. Еще Н. Бор, проквантовав уровни атома водорода, заметил, что плотность этих уровней расходится при приближении к границе ионизации. Статистический вес уровня $2s^2$, энергия уровня $E_s = -Ry/s^2$, расстояние между уровнями $2Ry/s^3$, отсюда плотность уровней расходится как $g(s) = s^5/Ry$ или как $g(E_s) = Ry^{3/2}|E_s|^{-5/2}$ (рис. 1), в то время как распределение свободных электронов описывается с помощью распределения Максвелла, которому соответствует плотность состояний $g(E_s) \sim E^{1/2}$, поскольку $v^2 dv \sim E^{1/2} dE$.

Таким образом, на границе ионизации возник разрыв в описании электронных состояний: парные электрон-ионные состояния — для отрицательных энергий и состояния свободных электронов — для положительных энергий. Домножение на фактор Больцмана дает распределение концентраций для возбужденных атомов и распределение Максвелла — для свободных электронов, но никак не влияет на существование разрыва.

Укажем также на существование плазменных волн, т. е. коллективных состояний в системе сво-

бодных электронов. Электронный спектр описывается квантовыми состояниями возбужденных атомов ниже границы ионизации, а выше — дисперсией частоты и декремента затухания плазменных волн, т. е. коллективными возбуждениями в системе взаимодействующих друг с другом классических электронов. Из сказанного следует, что уточнение описания системы свободных электронов только усугубило разрыв между ветвями электронного спектра: никакого аналитического перехода между ними нет.

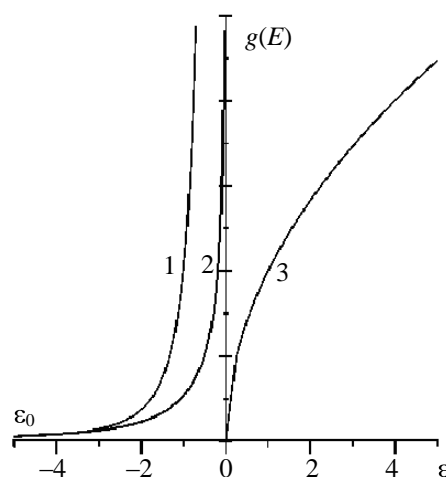


Рис. 1. Щель в описании энергетического спектра электронов. Статистический вес состояний, соответствующий:

- 1 — кулоновскому полю; 2 — статистической сумме Планка-Ларкина; 3 — распределению Максвелла

Поскольку проблема возникла давно, то и рассматривалась она неоднократно. Свободные и парные связанные состояния совместно рассмот-

рены в рамках квантовой статистической физики [2, 3, 8]. Этот подход дает сходящееся выражение для статистической суммы в форме Планка—Ларкина, но справедлив только в пределе нулевой плотности плазмы. Недостатки подхода: он не учитывает, что в идеальной плазме любой конечной плотности всегда существует область высоковозбужденных состояний, примыкающих к границе ионизации, которые нельзя рассматривать в парном приближении, поскольку они возмущаются окружающими частицами; в этом подходе отсутствует переход к спектру коллективных возбуждений свободных электронов. Только парные состояния рассматриваются как слева, так и справа от нуля. Кроме того, подход не годится для рассмотрения оптических и других свойств плазмы, он справедлив только в термодинамике.

Ввиду практической важности неидеальной плазмы эти вопросы для нее также многократно рассматривались. Однако во всех известных способах дискретный и непрерывный спектры, по-прежнему, рассматриваются отдельно. Статистическая сумма атома тем или иным способом ограничивается, независимо подсчитывается энергия взаимодействия свободных зарядов друг с другом, и полученные вклады двух ветвей спектра складываются.

Разрыв между двумя ветвями спектра на рис. 1 представляется искусственным. Настоящая работа посвящена устранению этого разрыва, развитию разумного описания области спектра, промежуточной между дискретными и непрерывными уровнями энергии электронов, построению плавной связи между ними. Развивается подход, который был бы справедлив как для свободных, так и связанных состояний, включая переходную область, т. е. учитывал бы коллективные взаимодействия не только для положительных, но и отрицательных энергий. Предпринята попытка совместного рассмотрения свободных и парных “связанных состояний” (высоковозбужденных атомов) в неидеальной плазме.

При моделировании неидеальной равновесной плазмы методом молекулярной динамики (МД) фактически в рамках одного расчета, как и в реальной плазме, возникают все виды флуктуаций. Метод МД дает единый подход к рассмотрению всех возможных флуктуаций в плазме, однако для изучения флуктуаций каждого типа требуется своя диагностика.

В данной работе при изучении парных связанных состояний использовался метод диагностики, развитый в работах [18—20]. Особенности численного моделирования неидеальной плазмы были описаны в работе [21].

Затронуты также вопросы особенностей строения энергетических спектров электронов и связанных пар в неидеальной плазме. Сделаны выводы об ограничении парных флуктуаций в области малых энергий связи, установлены особенности переходной области между парами и свободными электронами, обосновывается вывод о существовании щели в энергетическом спектре электронов. Обсуждается, как парные флуктуации при увеличении энергии связи и времени жизни и уменьшении неидеальности переходят в состояния, которые можно соотнести с высоковозбужденными атомами. Уточняются представления о части спектра, примыкающей к границе ионизации.

Модель. Методы расчета и диагностики

Исследуется невырожденная система, состоящая из однократных ионов и электронов с массами M и m . Большинство расчетов проведены при $M/m = 100$. Проверялось, что свойства парных флуктуаций уже слабо зависят от отношения $M/m > 10$.

Параметр неидеальности брался равным $0,3 \leq \Gamma = (4\pi n_e / 3)^{1/3} (e^2 / k_B T) \leq 2$. Число частиц в ячейке $N = 500—600$. Это число должно быть таким, чтобы размер ячейки был много больше радиуса экранирования. Поскольку таким радиусом в неидеальной плазме оказывается среднее расстояние между частицами, N порядка 10^2 оказывается достаточным при $\Gamma \approx 1$ для расчета как термодинамических свойств и дисперсии плазменных волн в равновесной плазме, так и электрон-ионной релаксации в неравновесной плазме [21].

Важным вопросом при молекулярно-динамическом моделировании неидеальной плазмы является выбор потенциала взаимодействия электронов и ионов в плазме. Для обеспечения термодинамической устойчивости последней оказывается достаточным ограничить глубину электрон-ионного потенциала. Такое ограничение может быть построено по-разному. Примерами таких потенциалов является, например, потенциал Дойча, который полностью исключает из рассмотрения все связанные состояния и в силу этого применим лишь в пределе высоких температур. При более низких температурах используется потенциал Кельбга, который позволяет удовлетворительно моделировать свойства равновесной плазмы. Однако его применение оказывается затруднительным, поскольку в данный потенциал входит температура плазмы, которая не определена в случае, если плазма неравновесная.

Кроме того, все типы псевдопотенциалов искажают сечение рассеивания электрона на ионе, которое оказывается в этом случае существенно от-

личным от сечения Резерфорда. Напомним, что сечение Резерфорда возникает как при классическом, так и квантовом рассмотрении кулоновского рассеивания. Последнее ставит под сомнение возможность описания динамических процессов при использовании псевдопотенциалов, если результат оказывается зависимым от некулоновской части потенциала.

При описании неидеальной плазмы приемлемым является ограниченный кулоновский потенциал, который совпадает с кулоновским на расстояниях $r > r_0 = e^2 / E_0$ и равен $-E_0$ при $r < r_0$. По мере увеличения E_0 свойства данного потенциала будут приближаться к свойствам кулоновского потенциала. Поэтому, если в результате молекулярно-динамического исследования некоторая характеристика плазмы будет достаточно слабо меняться при увеличении E_0 , то это позволяет предположить, что она будет иметь то же значение и в случае реалистичного кулоновского потенциала, т. е. соответствовать величине, наблюдаемой в реальной плазме.

Алгоритм выделения парных флуктуаций построен следующим образом:

1 — МД рассчитываются траектории всех частиц в равновесной плазме в течение полного времени моделирования;

2 — на каждом шаге полученной МД-траектории последовательно просматриваются все электроны, и для каждого электрона производится поиск ближайшего к нему иона;

3 — на каждом участке МД-траектории, соответствующем одной и той же выбранной паре, подсчитывается энергия этой пары как суммы потенциальной энергии взаимодействия электрона и иона и кинетической энергии относительного движения

$$\varepsilon = U(r_{ei}) + \frac{\mu}{2}(\vec{v}_i - \vec{v}_e)^2 < 0,$$

где r_{ei} — расстояние между частицами в паре;

μ — приведенная масса частиц;

v_i и v_e — скорости иона и электрона.

Сказанное выше позволяет выделить участки, где энергия пары оказалась отрицательной, и т. е. где энергия пары положительна

4 — на участках, соответствующих отрицательной энергии пары, подсчитывается набег фазы электрона относительно иона как интеграла угловой скорости электрона:

$$\varphi = \int_{\Delta} (L_{ei} / \mu r_{ei}^2) dt,$$

где L_{ei} — момент импульса электрона при вращении вокруг иона;

5 — полученный набор парных флуктуаций сортировался по величинам φ (от одного до десяти оборотов) для последующего нахождения различных распределений.

Вероятность парной флуктуации $p(\varphi)$ с набегом фазы φ определялась как

$$p(\varphi) = \sum \tau_i^\varphi / N \tau_{full},$$

где τ_i^φ — время жизни состояния с набегом фазы φ ;

N — число частиц в ячейке;

τ_{full} — полное время моделирования.

Значение \bar{A} величин в плазме равно среднему по всем флуктуациям

$$\bar{A} = \int A_\varphi p(\varphi) d\varphi,$$

где A_φ — значения для группы флуктуаций с набегом фазы φ .

Концентрация парных флуктуаций с набегом фазы $\alpha_\varphi = N_\varphi / N$, где N_φ — число пар с набегом фазы φ в МД-ячейке.

Остановимся на ограничениях, накладываемых использованием квазиклассической модели на параметры парных флуктуаций, которые могут быть ею адекватно описанными [19]:

- классическая траектория электрона на орбите позволяет корректно описать состояние пары тогда, когда ее радиус оказывается много больше радиуса борковского;

- штарковское уширение $\Delta E \sim 2(h^2 / me^4) \times s(s-1)(kT)^2 = 0,9s(s-1)\Gamma^2$ эВ, где s — главное квантовое число. Учитывая, что расстояние между уровнями есть $\Delta E_{s,s+1} = 2Ry / (s^2(s+1))$, получаем критерий применимости в виде $s > 2\Gamma^{(-2/5)}$;

- характерное время жизни парной флуктуации в неидеальной плазме должно быть больше характерного радиационного времени;

- вероятности туннельного перехода и надбарьерного отражения между соседними ямами малы, они учитывались при рассмотрении многоэлектронной локализации в [7, 9];

- доля пар с малым временем жизни в реальной плазме существенно меньше, чем дает классическая модель.

В силу соотношения неопределенности из-за конечности времени жизни пар их энергия оказывается определена не вполне точно. Если эта неопределенность оказывается больше энергии связи пары, то становится невозможным сделать вывод о том, являются ли частицы в паре связанными

или свободными. Такую пару классической считать нельзя. Граница ϕ_0 , разделяющая “классические флуктуации” и “квантовые”, лежит в области времен жизни $h/\Delta E$, где ΔE — энергия ионизации пары с учетом влияния окружения. Оценка учета влияния окружения может исходить из геометрических соображений. Среднее расстояние от иона в паре до точки, где барьер для ухода электрона из пары оказывается минимален, равный порядка половины среднего расстояния между ионами, откуда $\Delta E \approx \varepsilon - 2kT$.

Распределение связанных состояний по энергии

Рассмотрим специфику подсистемы связанных электронов в области энергий, примыкающей к границе ионизации. Для их изучения был использован подход, описанный в работе [19].

Одной из основных характеристик данной подсистемы является распределение по энергии, которое далее будет описываться с помощью функции $Z(\varepsilon)$. Наиболее важным является относительное распределение по s или ε , поэтому нормировка будет выбираться из соображений удобства сопоставления различных подходов таким образом, чтобы при $\varepsilon \rightarrow -\infty$ величина $dZ(\varepsilon)/d\varepsilon$ стремилась к плотности распределения частиц в кулоновском поле

$$dZ/d\varepsilon = 0,5 \cdot Ry^{3/2} \cdot |\varepsilon|^{-5/2} \cdot \exp(-\varepsilon/kT).$$

Результаты моделирования распределения парных флуктуаций по энергиям при степенях неидеальности плазмы $\Gamma = 0,3; 0,6$ и 1 представлены на рис. 2. Плотность распределения парных флуктуаций по энергиям получена для трех различных значений глубины потенциальной ямы E_0 : $3, 5$ и $7 kT$.

Отметим три особенности этих распределений. Во-первых, для всех значений Γ при энергиях связи, меньших глубины потенциальной ямы, форма распределений, полученных при МД-моделировании, практически не зависит от E_0 . Во-вторых, при высокой энергии связи результаты моделирования оказываются близкими к распределению частиц для кулоновского потенциала. Эти две особенности говорят о корректности модели. Третья особенность — быстрый спад плотности распределения пар по энергиям в области малых энергий связи и наличие граничной энергии, ниже которой парные флуктуации практически не встречаются. Так, при $\Gamma = 1$ вклад парных флуктуаций стремится к нулю при энергии связи около $2 kT$.

Результаты, полученные при различных значениях степени неидеальности плазмы, качественно

совпадают. Однако при уменьшении степени неидеальности граница спектра смещается к нулю. Из рис. 1 можно найти значение E_{cr} , ограничивающее спектр парных флуктуаций. Зависимость E_{cr} от степени неидеальности плазмы близка к $E_{cr} = 2\Gamma \sim n^{1/3}$. Это может указывать на то, что верхняя граница энергетического спектра определяется средним расстоянием между ионами, что соответствует формуле Унзольда. Однако данной зависимости может быть дана и иная интерпретация: частота обращения электрона в паре $\omega \sim E^{3/2}$, а плазменная частота — $\omega_p \sim n^{1/2}$. В тех случаях, когда плазменная частота совпадает с периодом обращения пары, последняя начинает резонансно поглощать энергию плазменных волн, что делает ее неустойчивой, соответственно в этом случае граничная энергия оказывается равной $E_{cr} \sim n^{1/3}$, что не противоречит данным МД-моделирования. Выбор одного из двух данных механизмов ограничения энергии пары требует дальнейшего исследования.

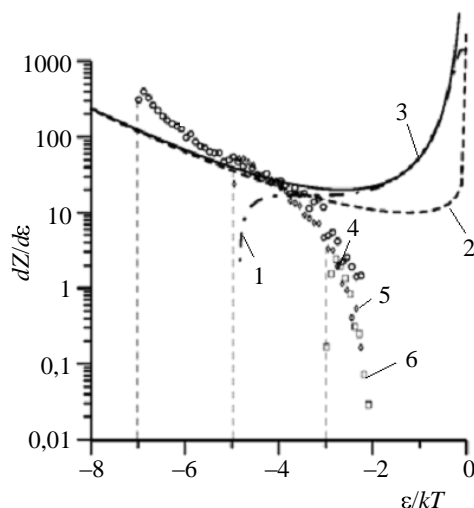


Рис. 2. Распределения по энергии парных флуктуаций в различных приближениях для плазмы при $\Gamma = 1$:

1 — распределение для дебаевского потенциала, ограниченное на глубине $5 kT$; 2 — распределение, соответствующее статистической сумме Планка-Ларкина; 3 — распределение для кулоновского потенциала; 4—6 — МД-моделирование при глубине потенциальной ямы $7, 5$ и $3 kT$, соответственно

Рассмотрим различные аппроксимации для распределения пар по энергиям и сравним с результатами моделирования. В кулоновском поле зависимость плотности распределения частиц от энергии связи ε оказывается функцией, расходящейся как $|\varepsilon|^{-5/2}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, а их статистическая сумма не может быть выражена конечным числом. Устранение этой расходимости в плазме удастся достичь, например, путем учета экранирования, т. е. выбором потенциала взаимодействия между частицами плазмы в форме дебаевского. Этот по-

тенциал обеспечивает зависимость вклада высоко-возбужденных состояний от энергии в виде

$$\frac{dZ}{d\varepsilon} = \frac{1}{h^3} \frac{2^{3/2}}{\pi} \times \int_0^{R(\varepsilon)} r_{ei}^2 \sqrt{\varepsilon - U_D(r_{ei})} dr_{ei}, \quad (1)$$

где $U_D(R)$ — потенциал Дебая;

$R(\varepsilon)$ — расстояние между частицами, на котором энергия взаимодействия равна ε .

Другой подход к описанию связанных состояний в идеальной плазме основан на расчете вклада высоковозбужденных состояний по Планку—Ларкину в виде

$$Z(s) = s^2 \left[\exp(Ry/(kTs^2)) - 1 - Ry/(kTs^2) \right]$$

или

$$\frac{dZ}{d\varepsilon} = 0,5 \cdot Ry^{3/2} |\varepsilon|^{-5/2} \times \exp(-\varepsilon/kT) - 1 + \varepsilon/kT. \quad (2)$$

Хотя статистическая сумма Планка—Ларкина для атома оказывается конечной, плотность распределения по энергии расходится в области малых энергий ε как $|\varepsilon|^{-1/2}$, тогда как в области энергий, больших $4 kT$, она практически совпадает с распределением, характерным для кулоновской ямы, что видно из рис. 2.

При энергиях, больших $4 kT$, результаты (1) и (2) приближаются к данным МД-моделирования. Однако обе формулы противоречат им вблизи порога ионизации. Здесь рассмотренные аппроксимации дают существенно большую плотность состояний, чем следует из молекулярно-динамической модели, причем разница увеличивается с ростом степени неидеальности плазмы.

Таким образом, образование пар с малой энергией связи в неидеальной плазме сильно подавляется и это, вероятно, является одним из основных различий свойств идеальной и неидеальной плазм.

От парных флуктуаций к возбужденным атомам

Рассмотрим переход от промежуточной между свободными электронами и атомами области парных флуктуаций к атомам. Границу между ними целесообразно провести так, чтобы она соответствовала некоторому характерному уширению атомных уровней. Электрон-ионные пары, для которых оно мало по сравнению с расстоянием между соседними уровнями, следует рассматривать как атомы. В противном случае, если уширение соизмеримо с расстоянием между соседними атомными уровнями, в результате чего пара оказывается в

квазинепрерывном спектре, ее надо считать флуктуацией.

Уровни при штарковском расщеплении и перекрытии возникающих при этом плотно расположенных подуровней образуют полосы. Полосы, соответствующие различным главным квантовым числам, перекрываются в определенной области значений n_e и T . Соответственно, в этих областях пары будут являться флуктуациями, а в остальной области параметров — атомами. Граница между областями параметров плазмы, где пара представляет собой флуктуацию, а где — возбужденный атом, показана на рис. 3, а кривой 1. На этом же рис. кривая 2 обозначает ограничивающую область, в которой парные флуктуации практически отсутствуют. Эта область соответствует примыкающему к границе ионизации на рис. 1 интервалу энергий шириной $\sim 2 kT$. Зависимость ширины этого интервала от Γ дана на рис. 2.

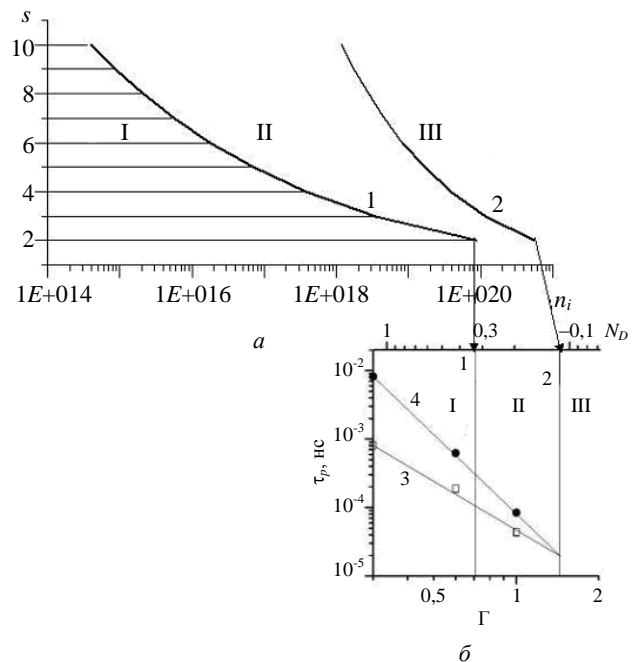


Рис. 3. Параметры плазмы:

а — характерные области существования пар: область дискретного спектра I, область флуктуаций II, область без атомов и флуктуаций III;

s — главное квантовое число;

б — диапазон времен жизни пар, соответствующих второму уровню атома водорода, при различной степени неидеальности: 1 — граница между атомами и флуктуациями; 2 — граница между областью существования пар и областью, где пары отсутствуют; 3 — линия максимума распределения пар по времени; 4 — линия, где число пар в 100 раз меньше, чем в максимуме

На рис. 3 можно выделить три области. В области I пары характеризуются дискретным энергетическим спектром, эту область можно считать областью существования атомов. В области II пары имеют квазинепрерывный энергетический спектр, это область флуктуаций. Существенно новым ре-

зультатом является то, что МД-моделирование дает возможность предположить существование еще одной области III, где как атомы, так и флуктуации отсутствуют. Поскольку величина штарковского уширения зависит главным образом от концентрации, а произведение $T\Gamma$ пропорционально $n^{1/3}$ и не зависит от температуры, то положение указанных областей на рис. 3, *a* также определяется прежде всего концентрацией и слабо зависят от температуры.

Дополнительный аргумент в пользу существования области, где пары отсутствуют, представлен на примере для первого возбужденного уровня атома водорода при $T = 1,5$ эВ (см. рис. 3, *b*). Вертикаль 1, соответствующая точке на кривой 1 на рис. 3, *a* разделяет области, где существует первый возбужденный уровень и где он сливается со вторым возбужденным уровнем. Линия 3 (см. рис. 3, *b*) соответствует положению максимума в распределении пар по временам жизни, полученному согласно результатам МД-моделирования, на линии 4 число пар падает по сравнению с максимумом в 100 раз. Эти линии ограничивают область, где сосредоточена большая часть пар. Зависимость, изображенная линией 3, от степени неидеальности оказывается заметно более слабой, чем зависимость, изображенная линией 4. Если экстраполировать эти линии в область высоких неидеальностей, то они пересекаются, что свидетельствует об исчезновении пар. Вертикаль 2 (см. рис. 3, *b*) проходящая через точку пересечения линий 3 и 4, разделяет область преобладания парных флуктуаций и область, где пары практически отсутствуют.

Таким образом, на диаграмме можно выделить три характерные области. В первой области при $\Gamma < 0,7$ ($N_D > 0,329$) преобладают атомы в первом возбужденном состоянии, а парные флуктуации соответствуют более высоким возбужденным состояниям. Во второй области при $\Gamma = 1,2—0,7$ ($N_D = 0,15—0,329$) преобладают парные флуктуации, а в третьей при $\Gamma > 1,2$ ($N_D < 0,15$) ни атомы, ни флуктуации не играют существенной роли. Границы 2 между областями II и III на рис. 3, *a* и *b* согласуются между собой. Напомним, что для области III параметров цезиевой плазмы еще в работе [22] было замечено, что результаты измерений можно объяснить, если исключить из рассмотрения все возбужденные состояния.

Распределение электронов по энергии в неидеальной плазме

Рассмотрев область парных флуктуаций и ее переход к атомам, приведем описание распределения электронов по энергии в системе в целом.

Распределение электронов по энергии имеет несколько характерных областей. Первая такая область — область свободных электронов, вторая —

связанных пар, которые могут существовать как флуктуации (если находятся в квазинепрерывном спектре) или как атомы (если в дискретном). Между первой и второй областями должна существовать еще одна, третья, где находятся электроны, локализованные в длинноволновых флуктуациях плотности (многочастичные флуктуации).

Как было видно в предыдущем разделе, вклад связанных пар в области энергий электронов, близких к нулю, быстро уменьшается, в то время как область многочастичных флуктуаций, по видимому, является достаточно слабо заселенной. Это создает предпосылки к формированию щели в энергетическом спектре электронов [18].

Существование такой щели может быть проверено путем непосредственного МД-моделирования. Результаты такого моделирования представлены на рис. 4, которое было проведено для потенциала электрон-ионного взаимодействия $15 kT$ и двух значений неидеальности $\Gamma = 0,6$ и 1 . Эти результаты показывают, что между областью свободных и связанных электронов существует отчетливо выраженная мягкая щель в энергетическом спектре, в которой плотность электронов падает по сравнению с максимумом, расположенным около нулевой энергии более чем на порядок.

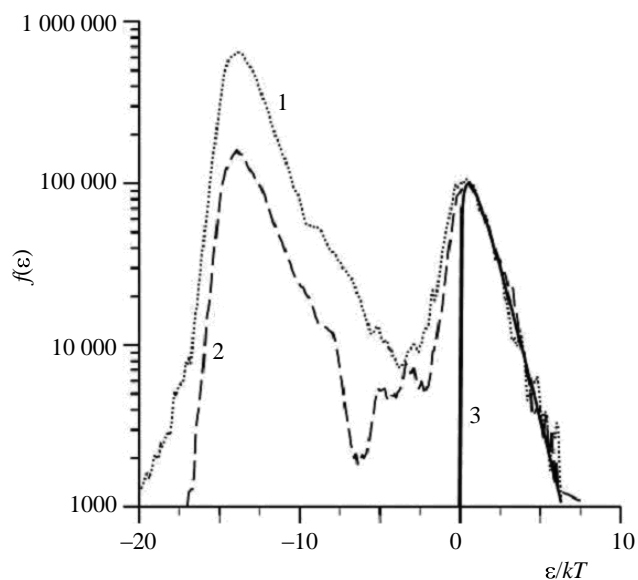


Рис. 4. Распределение электронов по энергии в плазме: 1 — результаты МД-моделирования при параметре неидеальности $\Gamma = 1$; 2 — при $\Gamma = 0,6$; 3 — распределение Максвелла

Второй максимум, расположенный в области энергии $\varepsilon = -14 kT$, является чисто численным эффектом, обусловленным конечной глубиной потенциальной ямы. Отметим, что в системе присутствует также определенное число пар с энергией $\varepsilon < -15 kT$, данное явление, вероятно, обусловлено тем, что пары взаимодействуют с окружающими их частицами, формируя вокруг себя ионные кла-

стеры. С увеличением неидеальности число электронов с аномально низкой энергией увеличивается, что говорит о том, что такие ионные кластеры, возникающие вокруг связанных пар, могут играть значительную роль в сильнеидеальной плазме с $\Gamma > 1$. Однако это явление требует дополнительно изучения.

В области положительных энергий полученное распределение высокой точностью описывается распределением Максвелла, при этом смещение распределения Максвелла в область отрицательных энергий не наблюдается.

Таким образом, можно сделать вывод, что свободные электроны независимо от степени неидеальности плазмы занимают область $\epsilon \geq 0$, и смещения ее границы в область отрицательных энергий не происходит. Однако с ростом неидеальности граница области связанных пар смещается в отрицательную область, следовательно, перекрытие кулоновских ям соседних ионов расширяет только область многочастичных флуктуаций.

Функцию распределения электронов можно записать в виде следующего соотношения:

$$f(\epsilon) = g(\epsilon) \cdot \exp(-\epsilon / kT),$$

где функция $g(\epsilon)$ — имеет смысл статистического веса состояния с энергией ϵ .

Вид функции $g(\epsilon)$, полученной в результате молекулярно-динамического моделирования при степени неидеальности плазмы $\Gamma = 0,6$, представлен на рис. 5. На нем также нанесены теоретические g -функции для распределения Максвелла, распределения электронов в кулоновском поле и g -функция, вычисленная для связанных электрон-ионных пар на основании результатов молекулярно-динамического моделирования.

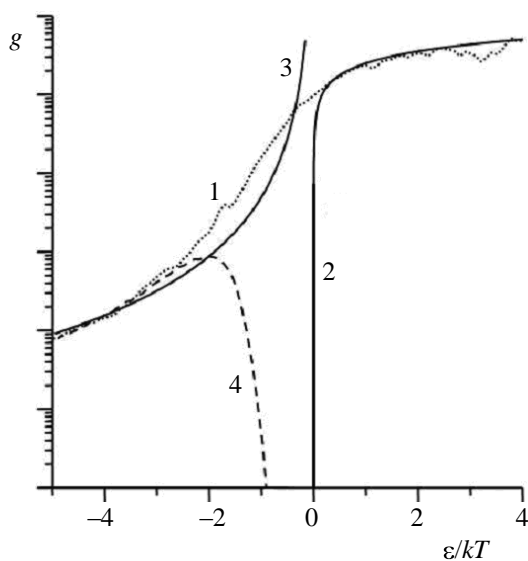


Рис. 5. g -функция для электронов в плазме: 1 — результаты МД-моделирования; 2 — распределение Максвелла; 3 — распределение в кулоновском поле;

4 — распределение парных флуктуаций согласно результатам МД-моделирования

В области положительных энергий, вплоть до энергий, очень близких к нулевой, g -функция, полученная на основе молекулярно-динамического моделирования, хорошо согласуется с g -функцией, соответствующей распределению Максвелла, здесь расположена область свободных электронов. В области энергий $\epsilon < -3kT$ g -функция, вычисленная только для связанных электронов, совпадает с той, которая вычислена для всех. Таким образом, в этой области практически все электроны при данном значении степени неидеальности плазмы находятся в виде связанных пар. Последние остаются в достаточной мере представленными в системе вплоть до энергий $\epsilon < -1,2 kT$, однако в области $-3 kT < \epsilon < -1,2 kT$ кривые g -функций, вычисленных только для связанных состояний и для всех электронов, начинают достаточно сильно различаться между собой. Соответственно, в этой области присутствуют как парные, так и многочастичные флуктуации. Наконец, в области $-1,2 kT < \epsilon < 0$ преобладают многочастичные флуктуации. Результаты моделирования показывают, что заселенность области многочастичных флуктуаций экспоненциально уменьшается по мере удаления в отрицательную область от нулевой энергии, что способствует формированию щели в энергетическом спектре.

Формирование щели в энергетическом спектре электронов может оказать существенное влияние на протекание элементарных процессов в плазме, в частности, на протекание процесса столкновительной рекомбинации.

Выводы

Рассмотрено самосогласованное описание свободных и связанных состояний электронов в неидеальной плазме. Предложенный подход преодолевает искусственный разрыв в описании электронных состояний на границе ионизации: парных электрон-ионных состояний для отрицательных энергий и коллективных состояний системы свободных электронов — для положительных. В рамках такого подхода с помощью метода молекулярной динамики получены следующие результаты.

- Показано, что в неидеальной плазме наблюдается ограничение вклада в статистическую сумму парных флуктуаций, аналогичных возбужденным атомам. Плотность распределения этих флуктуаций по энергиям при малых энергиях связи ϵ быстро уменьшается. Существует область энергий, примыкающая к границе ионизации, где парные флуктуации практически отсутствуют. В то же время дебаевское приближение дают конечное, а приближение Планка–Ларкина — расхо-

длежащее, как $|\varepsilon|^{-1/2}$, значения плотности состояний вблизи границы ионизации, т. е. не обеспечивают адекватного описания вкладов флуктуаций типа слабосвязанных пар в области малых энергий связи. В области больших энергий связи результаты моделирования согласуются с распределением по энергиям в кулоновском поле, что подтверждает корректность модели.

- Отмечена корреляция между значением энергии, ограничивающей энергетический спектр парных флуктуаций, и средним расстоянием между ионами, а также ограничением, обусловленным резонансным совпадением плазменной частоты и частоты обращения электрона в плазме.

- Рассмотрено распределение электронов по энергии и получены указания на наличие в нем мягкой щели. Установлено, что свободные электроны характеризуются максвелловским распределением, начало которого не смещается в отрицательную область энергий при любых значениях степени неидеальности плазмы. Подтверждено, что перекрытие кулоновских ям соседних электронов ведет к формированию области многочастичных флуктуаций.

Выражаем признательность И. В. Морозову за обсуждения. Расчеты выполнены на вычислительном кластере ФМБФ МФТИ. Авторы благодарят за поддержку фонд некоммерческих программ "Династия".

Работа частично поддержана программами фундаментальных исследований РАН № 9 "Исследования вещества в экстремальных условиях" (раздел I) и № 14 "Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий" (разделы I и II), грантом РФФИ 07-08-00738 и Sandia National Laboratories по программе "U.S. DOE/NNSA Advanced Simulation and Computing".

Л и т е р а т у р а

1. Фортос В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т. Физика неидеальной плазмы. — М.: Физматлит, 2004.
2. Эбелинг В., Крефт В., Кремн Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. — М.: Мир. 1979
3. Крефт В.-Д., Кремн Д., Эбелинг В., Ренке Г. Квантовая статистика систем заряженных частиц. — М.: Мир. 1988.
4. Иосилевский И. Л.// В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы/ Под ред. В. Е. Фортова. Вводный том, кн. I. — М.: Наука 2000. С. 275.
5. Воробьев В. С.// Там же. С. 293.
6. Грязнов В. К.// Там же. С. 299.
7. Каклюгин А. С., Норман Г. Э.// Там же. С. 402.
8. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортос В. Е.// В кн.: Ударные волны и экстремальные состояния вещества/ Под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р.Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. — М.: Наука. 2000. С. 342.
9. Копышев В. П., Медведев А. Б., Хрусталева В. В.// В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы/ Под ред. В. Е. Фортова. Сер. Б. Т. III-1 "Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы"/Под ред. А. Н. Старостина, И. Л. Иосилевского. — М.: Физматлит, 2004. С. 59.
10. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортос В. Е.// Там же. С. 111.
11. Демура А. В.// Там же. С. 163.
12. Каклюгин А. С., Норман Г. Э.// Там же. С. 248.
13. Муленко И. А., Олейникова Е. Н., Хомкин А. Л.// Там же. С. 277.
14. Иосилевский И. Л.// Там же. С. 349.
15. Plank M.// Ann. der Phys. 1924. Bd. 75. S. 673.
16. Fermi E. Über die// Z. Phys. 1924. Bd. 26. S. 54.
17. Бриллюэн Л. Квантовая статистика. — Харьков, Киев: ГНТИ Украины. 1934.
18. Каклюгин А. С., Норман Г. Э.// ТВТ. 1984 Т. 22. № 6. С. 1041.
19. Ланкин А. В., Норман Г. Э.// ДАН.2008 418 466.
20. Ланкин А. В., Норман Г. Э.// ТВТ. Т. 46. № 2. С. 170—184.
21. Морозов И. В., Норман Г. Э.// ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 2. С. 412.
22. Ломакин Б. Н., Фортос В. Е.// Там же. 1972. Т. 63. № 1. С. 92.

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2008 г.

Fluctuation approach in the theory of nonideal plasma.

Part I. Equilibrium plasma

A. V. Lankin, G. E. Norman

Joint Institute for High Temperatures of RAS, Moscow, Russia

Structure of energy spectrum of electron in nonideal plasma is studied using method of molecular dynamics. Pair fluctuation is separated. Pair fluctuation change to excited atom by decreasing of nonideality parameter. Areas of existing of atoms and pair fluctuations are appreciated. Gap in energy spectrum is discovered.

PACS: 52.25.-b

УДК 533.9

Флуктуационный подход к описанию неидеальной плазмы.

Часть II. Столкновительная рекомбинация в неравновесной плазме

A. V. Lankin, G. E. Norman

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Предложена модель, позволяющая рассмотреть кинетику столкновительной рекомбинации в неидеальной плазме в рамках метода молекулярной динамики. Найдено, что зависимость скорости столкновительной рекомбинации от степени неидеальности плазмы существенно отличается от экстраполяции скорости трехчастичной рекомбинации в неидеальную область. Обнаружено резкое снижение скорости рекомбинации в сильнонеидеальной плазме с увеличением степени ее неидеальности. Столкновительная рекомбинация переходит в трехчастичную при уменьшении неидеальности среды.

PACS: 52.25.-b

Введение

Процесс рекомбинации в неидеальной плазме существенно отличается от рекомбинации в идеальной плазме и имеет ряд особенностей. Влияние неидеальности на рекомбинацию в различных приближениях рассматривалось в [1—6]. Данная работа посвящена изучению столкновительной рекомбинации в неидеальной плазме.

Впервые эта проблема рассматривалась в [1], где сделана попытка учета исчезновения высоколежащих уровней в неидеальной плазме. Иной подход используется в работе [2], где исходя из анализа дрейфа Фокера—Планка электронов по энергии в неидеальной плазме приходят к выводу

о существенном снижении скорости рекомбинации в ней. Хотя этот качественный вывод подтверждается в других работах, но количественные оценки скорости рекомбинации в [2] нельзя считать удовлетворительными, поскольку в данной работе не учитывается исчезновение части высоковозбужденных уровней, что ведет к ее сильному подавлению [1, 3]. Важную роль в процессе рекомбинации должны играть микрополя плазмы. Их детальный учет сделан в работе [4], где было показано, что должно иметь место сильное подавление рекомбинации через высоковозбужденные уровни в области сильнонеидеальной плазмы ($\Gamma > 1$). Данные работы основаны на принципе детального равновесия. При этом в них вероятности