

# ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ В НЕИДЕАЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

*А. А. Бобров<sup>а</sup>, С. Я. Бронин<sup>б</sup>, Б. Б. Зеленер<sup>а\*</sup>, Б. В. Зеленер<sup>б</sup>, Э. А. Манькин<sup>а</sup>*

<sup>а</sup> *Московский инженерно-физический институт (государственный университет)  
115409, Москва, Россия*

<sup>б</sup> *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
127412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 октября 2007 г.

Предложена модель водородоподобной низкотемпературной неравновесной неидеальной плазмы, позволяющая методом молекулярной динамики рассчитывать кинетические характеристики плазмы с учетом взаимодействия между частицами. Заряды взаимодействуют по закону Кулона, в случае разноименных зарядов на расстоянии меньше нескольких радиусов Бора взаимодействие принимается равным константе. Для системы частиц решались классические уравнения движения в рамках периодических граничных условий. Начальные условия задавались так, что электроны имели положительную полную энергию. Рассматривались температуры 1–50 К и плотности  $n = 10^9$ – $10^{10}$  см<sup>-3</sup>, создаваемые в эксперименте при помощи лазерного охлаждения и резонансного возбуждения. Рассчитана плотность электронных состояний в зависимости от параметра неидеальности плазмы, а также коэффициент диффузии электронов в пространстве энергии для высоковозбужденных (ридберговских) состояний электрона, близких к границе дискретного и непрерывного спектров.

PACS: 52.27.Gr, 52.65.Yy

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к распределению электронов по энергетическим состояниям обусловлен необходимостью определения различных характеристик плазмы: радиационных потерь энергии, потерь энергии на ионизацию и возбуждение, равновесного и неравновесного состава.

Вопрос о распределении возбужденных состояний атомов, молекул и их кластеров имеет первостепенное значение в физике газовых лазеров, лазерного охлаждения газов, многофотонной ионизации, в задачах плазмохимии, при разработке источников излучения, а также для понимания образования и распада конденсированного состояния из возбужденных атомных частиц.

В состоянии термодинамического равновесия за-

дача о распределении частиц по состояниям решается с помощью формулы Больцмана и однозначно связана с температурой. В случае равновесной плазмы, как известно (см., например, [1]), для концентраций атомов в состоянии  $k$  справедливы соотношения Саха:

$$n_k = n_m \frac{g_k}{g_m} \exp\left(-\frac{E_m - E_k}{T}\right), \quad (1)$$

$$n_k = n_e (n_e^+)^2 \Sigma_i \frac{(2m\pi T)^{3/2}}{g_k h^3} \exp\frac{E_k}{T}, \quad (2)$$

где  $n_k$ ,  $n_m$  — концентрации различных основных и возбужденных состояний атомов,  $n_e$ ,  $n_e^+$  и  $\Sigma_i$  — соответственно концентрация электронов, концентрация и статистическая сумма положительных ионов;  $g_k$  — статистический вес уровня  $k$ , а в общем случае — плотность состояний  $g(E)$ .

В отсутствие равновесия распределение электронов по уровням энергии в общем случае не харак-

\*E-mail: bobozel@mail.ru

теризуется какой-либо температурой, а определяется кинетическими процессами. В этом случае населенности уровней определяются системой кинетических уравнений баланса, записанных для каждого из возбужденных состояний с учетом всевозможных элементарных процессов, обедняющих или населяющих данный уровень.

Для определения состава равновесной плазмы и при решении кинетических уравнений баланса неравновесной плазмы необходимо знать статистический вес уровня  $k$ , а в случае высоковозбужденных состояний — плотность состояний электрона  $g(E)$ . В общем случае  $g(E)$  отличается от плотности состояний изолированного атома в пределе  $E_k/T \rightarrow 0$  из-за взаимодействия с частицами, окружающими данный атом.

## 2. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ $g(E)$

Плотность электронных состояний  $g(E)$  исследовалась ранее, например в работах [2–7].

Состояния энергии электрона в частично ионизованной плазме можно приблизительно классифицировать по трем группам.

Первая группа соответствует низким дискретным атомным уровням и плотность состояний электрона для этих уровней равна его статистическому весу.

В случае водорода и водородоподобных уровней

$$g_k = 2k^2, \quad (3)$$

где  $k$  — главное квантовое число (номер) уровня. Выращению (1) соответствует классическая плотность кулоновских состояний (см., например, [1])

$$g(E) = \frac{Ry^{3/2}}{E^{5/2}}, \quad (4)$$

или в безразмерном виде

$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi^2\gamma^3}{32|\varepsilon|^{5/2}}, \quad (5)$$

где  $\varepsilon = E/T$ ,  $T$  — температура, константа Ридберга  $Ry = 13.6$  эВ,  $\gamma = e^2 n_e^{1/3} / T$  — параметр неидеальности,  $e$  — заряд электрона.

Предполагается, что плотность зарядов такова, что микрополя в плазме не влияют на эти низколежащие значения энергий связанных электронов. Это справедливо в широкой области изменения плотностей зарядов.

Вторая группа — это высоковозбужденные (близкие к ридберговским) состояния с  $E < 0$ . В общем случае их нельзя считать состояниями электрона в атоме, так как в формировании электронного состояния участвуют заряженные частицы, которые окружают электрон-ионную пару, и выражения (4) и (5) в случае  $E \rightarrow -0$  расходятся.

Третья группа — электроны непрерывного спектра, для которых  $g(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$ .

В работах [2, 3] были предложены различные варианты интерполяции  $g(\varepsilon)$  в область малых энергий и на их основе получено уравнение ионизационного равновесия. В работе [4] было показано, что в классическом приближении в рамках второго вириального коэффициента функция  $g(\varepsilon)$  при малых энергиях имеет особенность:

$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi^2\gamma^3}{32|\varepsilon|^{5/2}} \quad \text{для } \varepsilon < 0, \quad (6)$$

$$g(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon} \left( 1 - \frac{\sqrt{4\pi\gamma^3}}{8\varepsilon^2} \right) \quad \text{для } \varepsilon > 0. \quad (7)$$

Там же, в работе [4], было показано, что эта особенность  $g(\varepsilon)$  интегрируется и при термодинамическом подходе не содержит расходимостей. Однако вопрос о составе плазмы из-за особенностей  $g(\varepsilon)$  остается открытым, так как неясно, какие электроны связаны, а какие свободны и дают вклад в проводимость плазмы.

В работах [5, 6] были предложены варианты вида функции  $g(\varepsilon)$  без особенностей, но они неоднозначны и не имеют четких границ применимости.

В работах [7, 8] в приближении ближайшего соседа была вычислена функция  $g(\varepsilon)$ , которая конечна во всей области  $\varepsilon$ . Авторами работ [7, 8] рассматривалась плотность состояний  $g(\varepsilon)$  в слабо-неидеальной плазме, когда плазменный параметр  $\alpha = \sqrt{4\pi\gamma^3} \approx 1$ . Рассмотрение проводилось в большом каноническом ансамбле. В этом случае

$$\gamma_z = e^2(z_e + z_i)^{1/3} / T, \quad (8)$$

где  $z_e, z_i$  — активности, соответственно, электрона и иона. Активности определяются через химический потенциал  $\mu$  следующим образом:  $z = e^{\mu/T} / \lambda^3$ , где  $\lambda = h / (2\pi\mu kT)^{1/2}$ .

Для  $g(\varepsilon)$  было получено выражение с использованием приближения ближайшего соседа для учета слабого взаимодействия электрона, находящегося в поле иона с окружением:

$$g(\varepsilon) = 4\pi^2\gamma^3 \int \frac{dy\sqrt{\varepsilon+y}}{y^4} \exp\left(-\frac{4\pi\gamma^3}{3y^3}\right). \quad (9)$$

Пределы интегрирования в правой части формулы (9) выбираются таким образом, чтобы подкоренные выражения были положительными. При больших отрицательных  $\varepsilon$  из формулы (9) можно получить плотность классических связанных кулоновских состояний (4), которая соответствует плотности состояний в квантовом случае (см., например, [1]). Плотность состояний в квантовом случае определяется статистическим весом в зависимости от главного квантового числа  $k$  водородного уровня. При этом статистический вес уровня равен  $g_k = 2k^2$ , а энергия  $E_k = me^4/2\hbar^2k^2$ . При  $\varepsilon \rightarrow -0$  плотность состояний значительно отличается от водородной и при  $\varepsilon = 0$

$$g(\varepsilon) = 0.72\gamma_z^{1/2}. \quad (10)$$

В случае  $\varepsilon \gg 0$ , как и следовало ожидать, получается плотность состояний свободных электронов:

$$g(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}. \quad (11)$$

Полученное для  $g(\varepsilon)$  в работах [7, 8] выражение (9) зависит от активностей  $z_e, z_i$ . Когда потенциальное взаимодействие между частицами равно нулю, имеем

$$z_e = n_e, \quad z_i = n_i, \quad \gamma_z = \gamma. \quad (12)$$

Однако равенства (12) не справедливы в случае неидеального газа и в работах [7, 8] предлагаются формулы для расчета концентраций заряженных частиц в зависимости от активности  $z$ .

Плотность состояний  $g(\varepsilon)$ , вычисленная в работах [7, 8], справедлива, как указывалось выше, для параметра неидеальности  $\gamma < 0.2$ . Аналитические результаты для области больших  $\gamma$  в настоящее время отсутствуют. В то же время существует настоятельная потребность в знании  $g(\varepsilon)$  для  $\gamma > 1$ , например, в связи с экспериментами по рекомбинации ультрахолодной плазмы [9, 10], создаваемой лазерными методами.

На основании экспериментальных работ [9, 10] в [11] была предложена упрощенная модель плазмы, которая позволила в достаточно простой постановке получить некоторые предварительные результаты. Методом молекулярной динамики была рассчитана функция распределения и плотность электронных состояний в плазме в зависимости от  $\gamma$ . В работе [11] были изложены предварительные расчеты. В настоящей работе мы представим и обсудим совокупность полученных нами результатов. Это позволит качественно определить весь процесс рекомбинации неидеальной низкотемпературной плазмы.

### 3. МОДЕЛЬ ПЛАЗМЫ, ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ДЛЯ РАСЧЕТА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Рассматривается система электронов и протонов, взаимодействующих по закону Кулона. В случае взаимодействия разноименных зарядов электрон–протон на расстояниях  $r < r_0$  (расстояние  $r_0$  варьировалось от 1 до 10 радиусов Бора) потенциал взаимодействия считается постоянным и равным  $e^2/r_0$ . Начальные скорости протонов задаются случайным образом, но так, что средняя кинетическая энергия составляет  $10^{-2}$ –1 К. Начальные скорости электронов задаются также случайным образом, но при этом полная энергия электрона положительна, т.е. все электроны по условиям задачи находятся в непрерывном спектре. Средняя кинетическая энергия на одну частицу варьируется от 1 до 50 К. Рассматривались концентрации частиц  $n \sim 10^9$ – $10^{10}$  см $^{-3}$ . Для этой системы частиц методом молекулярной динамики решались уравнения движения в рамках периодических граничных условий. Периодические граничные условия позволяют использовать в расчете сравнительно небольшое число частиц — порядка 100. Подобная модель, но с другими граничными условиями и в другой области температур и концентраций рассматривалась в статье [12].

Нами рассчитывалась функция распределения электронов  $f(E)$  в зависимости от энергии  $E$ , т.е. определялось число электронов, имеющих энергию  $E$ , отнесенное к полному числу электронов по следующей формуле:

$$f(E_i) = \frac{\sum_{k=1}^S f_k(E_i)}{N_e S \Delta E_i}, \quad (13)$$

где  $\Delta E_i$  — конечный интервал энергии,  $f_k(E_i)$  — число частиц в интервале  $\Delta E_i$  на отрезке времени  $\Delta t_k$ ,  $N_e$  — число электронов,  $S$  — число временных шагов. При этом энергия электрона рассчитывалась следующим образом:

$$E_i = \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}},$$

где  $m_i$  — масса электрона,  $v_i$  — скорость электрона,  $q_i$  — заряд электрона,  $q_j$  — заряд  $j$ -й частицы (+ $e$  для протона,  $-e$  для электрона),  $r_{ij}$  — расстояние между электроном и  $j$ -й частицей. Сумма берется по всем частицам в системе с учетом периодических граничных условий.

С течением времени за счет межчастичного взаимодействия электроны, значения энергии которых находились в непрерывном спектре, начинают заполнять состояния с отрицательными значениями энергии. Это соответствует началу процесса рекомбинации. Процесс формирования функции распределения является существенно более медленным, чем установление электронной температуры. Теоретические оценки, а также результаты расчетов работы [11] показывают, что термализация электронов при выбранных нами начальных температурах и плотностях происходит за времена порядка  $10^{-11}$ – $10^{-10}$  с, а формирование  $f(E)$  в области  $-2 \leq E/T \leq 0$  — за  $t \sim 10^{-8}$  с. За этот период времени температура электронов практически не меняется. В расчете определялась температура электронов путем аппроксимации полученных распределений скоростей электронов функцией Максвелла. Подобным способом определялась температура ионов. В работе [11] приведены значения  $T_e$  и  $T_i$  для нескольких расчетных точек. Шкала энергий для вычисления  $f(E)$  выбиралась в безразмерном виде,  $\varepsilon = E/T$ , и расчет проводился в области  $-2 < \varepsilon < 2$ . Нас интересовало поведение  $f(\varepsilon)$  в окрестности точки  $\varepsilon = 0$ , как в отрицательной, так и в положительной области энергий. Это связано прежде всего с тем, что выбранная нами модель правильно описывает формирование функции распределения энергии электронов в непрерывном спектре и в области квазиклассических высоковозбужденных ридберговских состояний. А в области  $\varepsilon \ll 0$  необходимо учитывать квантовые эффекты, приводящие к образованию связанных состояний. Далее, мы предполагали, что в окрестности  $\varepsilon = 0$  неравновесная функция распределения  $f(\varepsilon)$  является бoльцмановской, т. е.

$$f(\varepsilon) = g(\varepsilon) e^{-\varepsilon}. \quad (14)$$

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ $g(\varepsilon)$

Итак, методом молекулярной динамики нами рассчитывалась функция распределения электронов в области  $-2 \leq E/kT \leq 2$  для рекомбинирующей однократно заряженной неравновесной водородоподобной плазмы и по формуле (14) определялась плотность состояний  $g(\varepsilon)$ . Вследствие того, что вычисления проводились для очень низких температур, рассматриваемые абсолютные значения энергии  $E$  достаточно малы (например, при  $T = 1$  К энергия  $E = -2$  К, что соответствует значению главного квантового числа уровня изолированного ато-

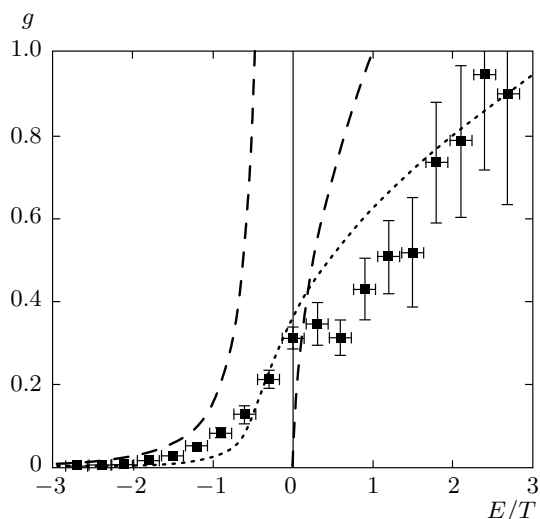


Рис. 1. Точки — результаты расчета  $g(\varepsilon)$ , пунктирная линия —  $g(\varepsilon)$  в приближении ближайшего соседа для  $z_e = 0.5n_e$ , штриховые линии — зависимости (6), (7)

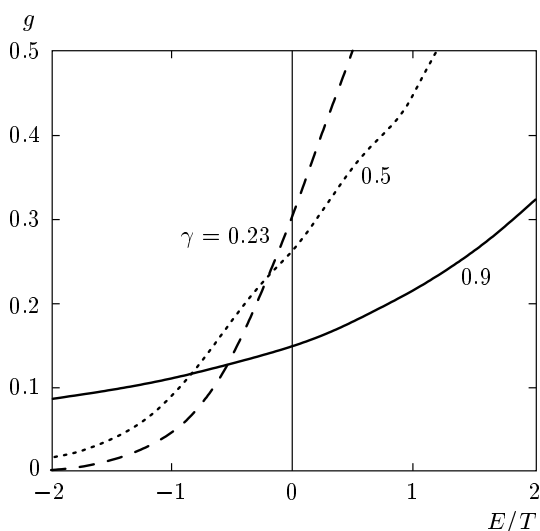


Рис. 2. Сглаженные результаты расчетов  $g(\varepsilon)$  для разных  $\gamma$

ма водорода  $k = 285$ ). Это позволяет получить конечные результаты за относительно небольшое время счета. Однако, так как расчет велся в безразмерных величинах, его можно рассматривать для различных  $n_e$  и  $T_e$ , но для определенного параметра неидеальности  $\gamma$ .

На рис. 1 представлены результаты расчетов для  $\gamma = 0.5$ . Видно, что полученная функция  $g(\varepsilon)$  хорошо описывается в приближении ближайше-

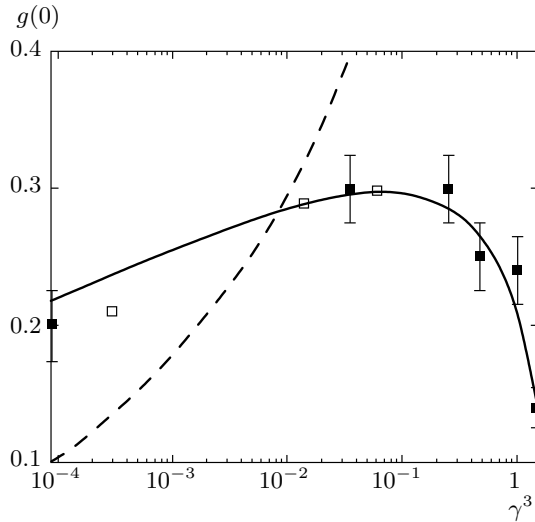


Рис. 3. Темные прямоугольники — рассчитанная зависимость значений  $g(0)$  от  $\gamma$ , светлые — результаты работы [12], штриховая линия — расчет по формуле (5)

го соседа (9), если подобрать значение активности  $z_e = 0.5n_e$ . Штриховыми линиями изображены зависимости (6), (7). На рис. 2 даны результаты расчетов, обработанные методом наименьших квадратов для нескольких  $\gamma$ . Как мы видим, в области  $\varepsilon = 0$  значения  $g(\varepsilon)$  сначала растут, а затем уменьшаются с ростом  $\gamma$ . Поведение  $g(\varepsilon)$  при  $\varepsilon = 0$  демонстрирует график на рис. 3. При увеличении  $\gamma$  функция  $g(0)$  достигает максимума, а затем стремится к нулю.

Необходимо отметить, что рассчитанная функция  $g(\varepsilon)$  очень сильно отличается от классической в области  $\varepsilon \approx -1$ , что может существенно повлиять на расчет кинетических уравнений баланса для заселенностей высоковозбужденных атомов в ультрахолодной плазме [9, 10, 13].

### 5. КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Для высоковозбужденных состояний, разделенных малыми энергетическими промежутками, естественно перейти от дискретной к непрерывной зависимости заселенности состояний от энергии. Если средняя энергия, передаваемая при столкновении много меньше температуры, движение электрона в энергетическом пространстве имеет характер диффузии с коэффициентом диффузии, определяемым следующим выражением:

$$D(E) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle E^2 \rangle. \tag{15}$$

Здесь  $\langle E^2 \rangle$  — средний квадрат энергии, передаваемой в единицу времени связанному в атоме электрону в состоянии  $E$  в результате столкновений:

$$\langle E^2 \rangle = \int dE' (E - E')^2 w(E, E'), \tag{16}$$

$w(E, E')$  — вероятность неупругого перехода частицы от  $E$  к  $E'$  в результате столкновения.

При столкновении слабосвязанного электрона со свободным в приближении, когда не учитывается взаимодействие с другими частицами был получен следующий результат (см. [1]):

$$D(E) = \frac{2\sqrt{2\pi} e^4 n_e E}{3\sqrt{mT_e}} \Lambda, \tag{17}$$

где  $\Lambda$  — кулоновский логарифм взаимодействия свободного электрона со слабосвязанным электроном с энергией  $E$  (см., например, график для  $\Lambda$  в [1]);  $e, m, n_e, T_e$  — соответственно заряд, масса, концентрация, температура электронов. Формула (17) справедлива для  $E \sim -kT$  в случае слабонеидеальной плазмы при  $\gamma \ll 1$ . Попытка учесть влияние взаимодействия была сделана в работах [14, 15] — там исследовалась рекомбинация сильнонеидеальной многократно заряженной плазмы с использованием приближения ближайшего соседа и была получена зависимость для  $D(0)$ :

$$D(0) = \frac{(2\pi)^{3/2} (4\pi/3)^{1/6} e^4 n_e \Lambda}{3\Gamma^2(5/6) \sqrt{m}} \sqrt{Z e^2 n_i^{1/3}}, \tag{18}$$

где  $Z$  и  $n_i$  — заряд и концентрация ионов,  $\Gamma$  — гамма-функция,  $\Gamma(5/6) \approx 1.18$ . При условии электронейтральности  $n_e = Z n_i$ .

При расчете по формуле (18) возникает неоднозначность, связанная с тем, что значение  $\Lambda$  может меняться на несколько порядков в зависимости от значения  $T/\Delta E$ , где  $\Delta E$  — энергия перехода (см., например, [1]). Кроме того, она не содержит зависимость от  $E$ . В данной работе нами был проделан расчет  $D(E)$  методом молекулярной динамики в модели, описанной в разд. 3, которая учитывает все межчастичные взаимодействия.

### 6. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА $D(E)$

Для расчета коэффициента диффузии электронов в пространстве энергий в нашей модели выбирался набор дискретных значений энергии  $\{E_i\}$  и

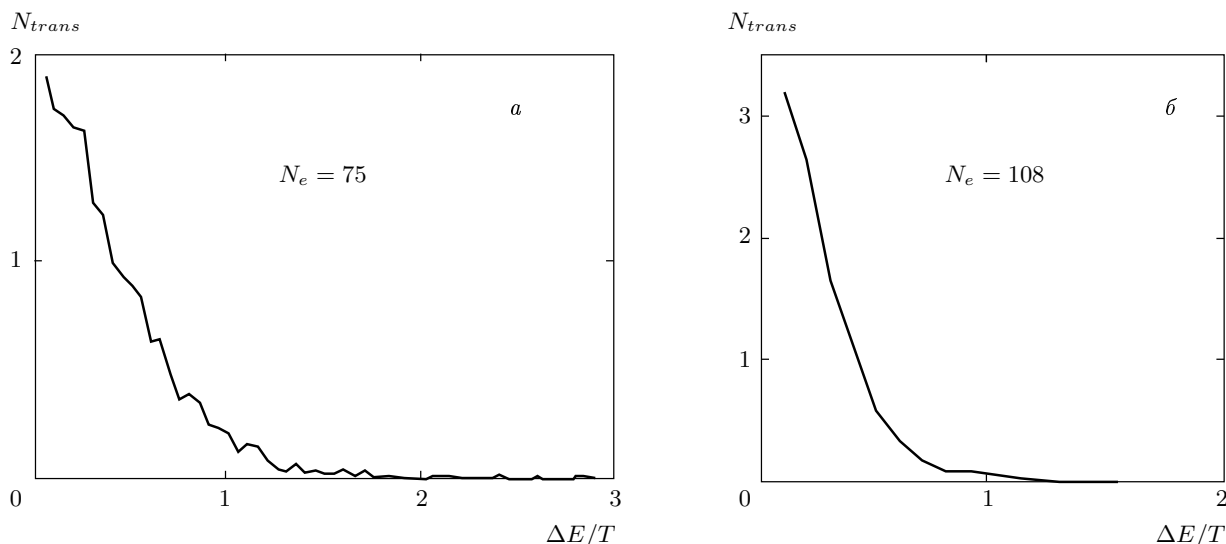


Рис. 4. Доля переходов в зависимости от переданной энергии для  $\gamma = 0.5$  (а),  $0.1$  (б), шаг по времени  $\Delta t = 10^{-10}$  с, полное время расчета  $t = 5.5 \cdot 10^{-9}$  (а),  $4.5 \cdot 10^{-9}$  (б) с;  $n = 10^{10}$  см $^{-3}$ ,  $T_e = 8$  К

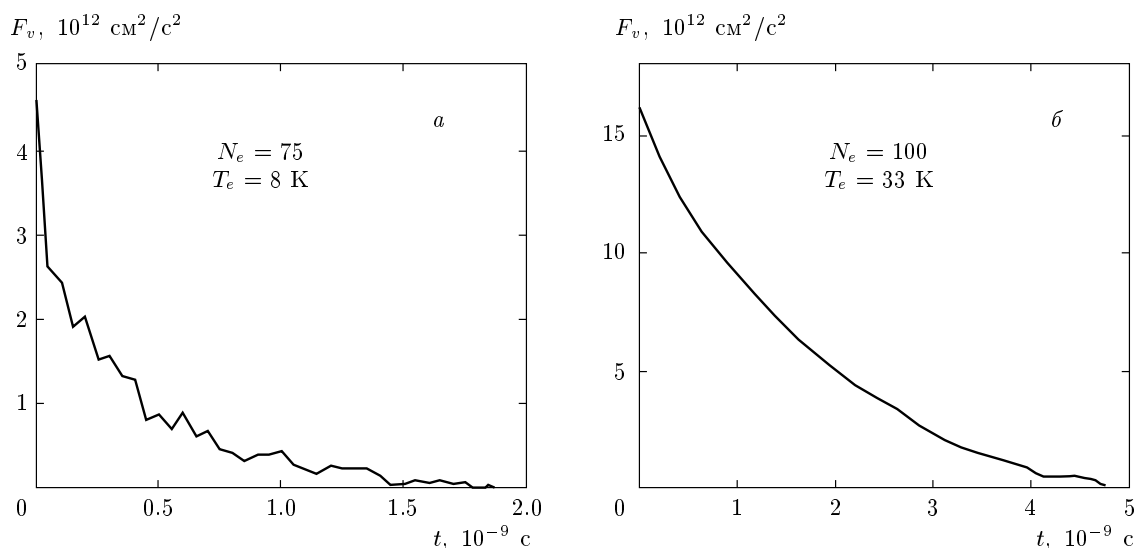


Рис. 5. Автокорреляционная функция скорости  $F_v$  для  $\gamma = 0.5$  (а),  $0.1$  (б), шаг по времени  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-11}$  с,  $n = 10^{10}$  см $^{-3}$

для каждого из этих значений рассчитывалось среднее значение  $D(E_i)$  в некоторой окрестности  $\Delta E_i$  по формуле:

$$D(E_i) = \frac{1}{2} \frac{\sum_j (E_i - E_j)^2 w(E_i, E_j)}{N \Delta t}, \quad (19)$$

где  $E_i$  — дискретные значения  $E$ ,  $w(E_i, E_j)$  — число переходов из окрестности  $E_i \pm \Delta E_i$  в окрестность  $E_j \pm \Delta E_j$  за интервал времени  $\Delta t$ ,  $N$  — число частиц,  $\Delta E_i = (E_{i+1} - E_i)/2$ . Для оценки правомочно-

сти представления о диффузионном характере движения электрона в энергетическом пространстве были выполнены расчеты распределения передаваемой энергии. Из этих расчетов следует, что преобладающими действительно являются значения передаваемой энергии, малые по сравнению с температурой. Эти результаты представлены на рис. 4. Нами вычислялась доля переходов в зависимости от передачи энергии  $\Delta \epsilon$ . В качестве шага усреднения выбран интервал  $\Delta t = \tau_D = T^2/D$ , где  $D$  определяется

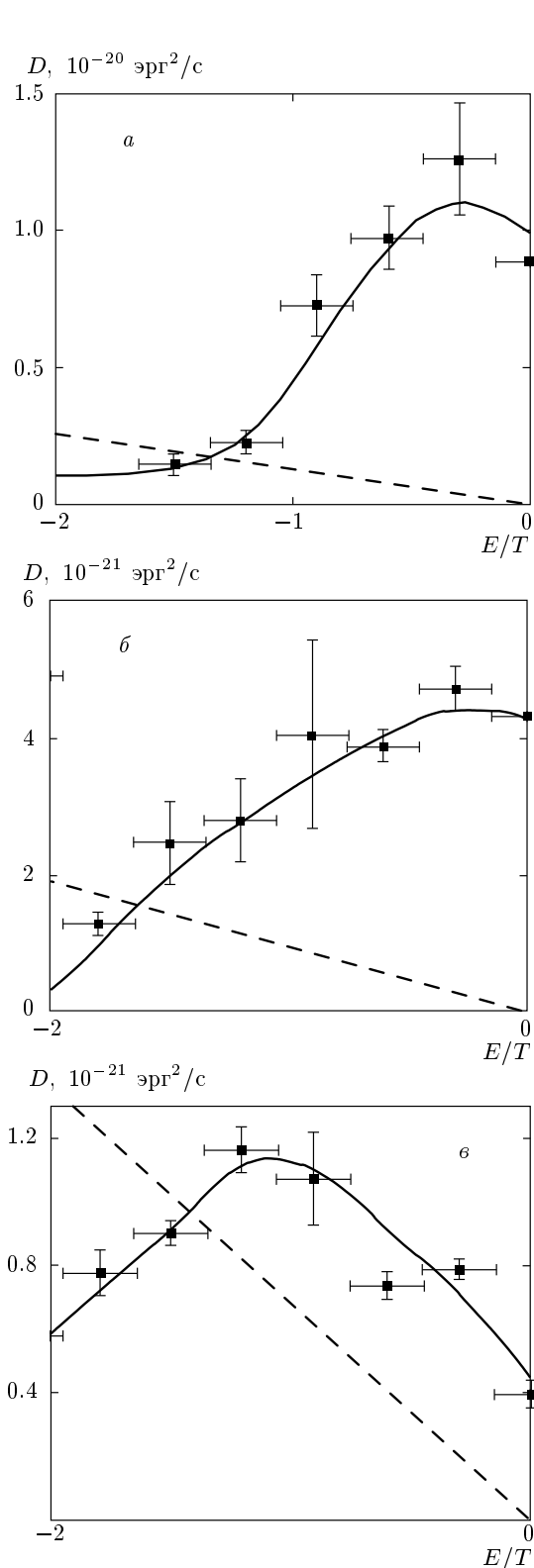


Рис. 6. Коэффициент диффузии электронов в пространстве энергий,  $\gamma = 0.23$  (а),  $0.5$  (б),  $0.9$  (е)

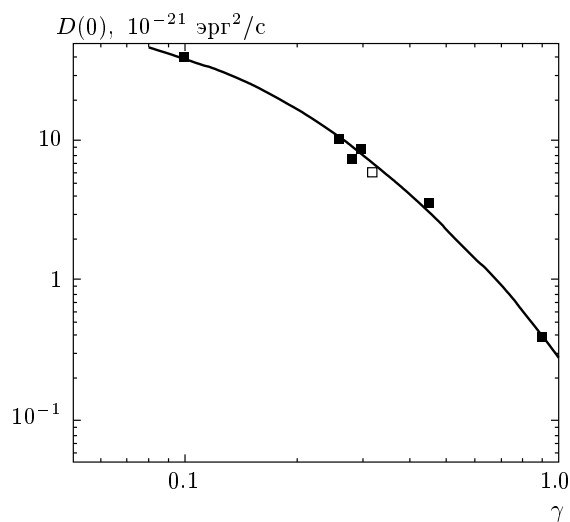


Рис. 7. Темные прямоугольники — рассчитанная зависимость значений  $D(0)$  от  $\gamma$ , светлые — результаты работы [12]

из наших расчетов. Как видно из рис. 4, основная часть переходов при передаче энергии соответствует  $\Delta\varepsilon < 0.5$ , что позволяет говорить о диффузионном процессе передачи энергии между электронами. Отметим, что с ростом  $\gamma$  время  $\tau_D$  приближается к времени затухания автокоррелятора скорости электрона  $\langle v_e(0)v_e(t) \rangle$ . На рис. 5 приведены расчеты автокоррелятора скорости для разных  $\gamma$ .

На рис. 6 представлены результаты расчетов  $D(E)$  для различных  $\gamma$  в области  $-2 \leq \varepsilon \leq 0$ . В отличие от формулы (17), рассчитанный нами коэффициент диффузии  $D(E)$  не обращается в нуль при  $\varepsilon = 0$ , а имеет конечное значение. При этом с ростом параметра неидеальности коэффициент диффузии  $D(0)$  уменьшается (рис. 7). По-видимому, это связано с зависимостью плотности состояний  $g$  от  $\varepsilon$ . При росте  $\gamma$  плотность состояний  $g(0)$  уменьшается, соответственно уменьшается  $D(0)$ . Также с увеличением  $\gamma$  появляется максимум  $D(E)$  в области  $\varepsilon < 0$ . На рис. 6 штриховыми линиями изображена зависимость (17). Видно, что в области  $\varepsilon \sim -1$  полученные нами расчетные значения  $D(E)$  не сильно отличаются от (17), но сама зависимость (17) имеет совершенно другой характер. Приближение (18) для  $D(0)$  совпадает с нашими расчетами, если положить, что  $\Lambda$  меняется в пределах  $5.3-0.2$  для различных  $\gamma$ .

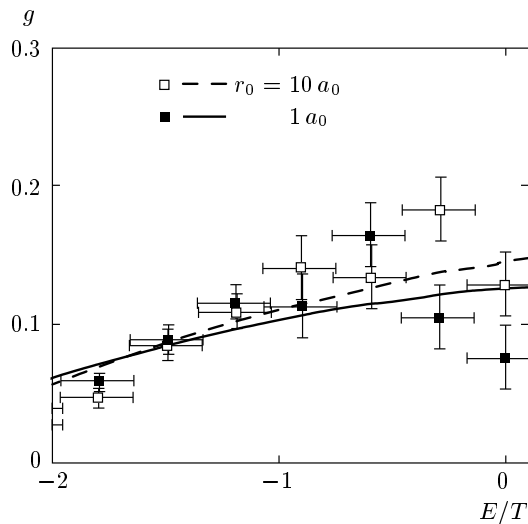


Рис. 8. Расчет  $g(\varepsilon)$  для разных  $r_0$ . Сплошная и штриховая линии — результат проведенной нами интерполяции

### 7. ОБСУЖДЕНИЕ

Попытки рассчитать скорость тройной рекомбинации для неидеальной плазмы были сделаны в ряде работ [14–16]. Однако эти попытки носили в основном оценочный характер.

В работах Яковленко с соавторами (см., например, [12]) методом молекулярной динамики рассчитывались различные характеристики классической неравновесной системы частиц с кулоновским взаимодействием между ними. На расстояниях, меньших  $r_0 = (0.01–0.05)r_{av}$ , где  $r_{av}$  — среднее расстояние между частицами, сила взаимодействия модифицировалась при помощи вспомогательной функции для обеспечения непрерывности и гладкости силы при  $r = r_0$ . Напомним, что в нашей работе расстояние  $r_0$  было фиксировано и не зависело от плотности плазмы. Влияние выбора  $r_0$  на полученные результаты проверялось как в работе [12], так и в нашей работе. Было показано, что результаты остаются неизменными в пределах ошибки расчетов. В качестве примера на рис. 8 для  $\gamma = 0.9$  приведены расчеты  $g(\varepsilon)$  для  $r_0 = a_0, 10a_0$ .

Выбор  $r_0$  связан с тем, что разностная схема, используемая для расчета движения многих частиц, приводит к необходимости уменьшения шага при уменьшении  $r_0$  для выполнения закона сохранения энергии. При этом приходится увеличивать объем вычислений, который тем больше, чем меньше  $r_0$ .

Необходимо отметить также, что в работе [12] расчеты проводились в области  $T_e = 0.1–2$  эВ и

$n = 10^{14}–10^{20}$  см<sup>-3</sup>, а мы проводили расчеты при  $T_e = 0.0001–0.003$  эВ и  $n = 10^8–10^{12}$  см<sup>-3</sup>.

Различие в области температур и плотностей приводит и к другим временным масштабам. Так, в работе [12] время установления равновесия составляло  $t = 5 \cdot 10^{-13}–7 \cdot 10^{-11}$  с при числе шагов до 15000. В нашем случае  $t = 10^{-9}–10^{-8}$  с и число шагов достигало  $10^6$ .

Низкая производительность вычислительных машин в 1990-х гг. обусловила необходимость использования различных математических приемов для уменьшения объемов вычислений [12]. Это позволило, с нашей точки зрения, получить достаточно надежные результаты в области энергий вблизи нуля.

Большое внимание в работе [12] уделено обсуждению выбора граничных условий при моделировании свойств систем многих частиц. При этом утверждается, что одни условия приводят к неправильным результатам, а какие-то влияют на установление равновесия. Естественно полагать, что при расчете свойств систем многих частиц от того, какие граничные условия используются, ничего не должно зависеть. Собственно говоря, для этого и увеличивается число частиц в выбранной ячейке, чтобы исключить эту зависимость.

Доказательством независимости от граничных условий, с нашей точки зрения, является тот факт, что результаты, полученные в работе [12] для плотности состояния и коэффициента диффузии при  $E = 0$  и для граничных условий с зеркальными и диффузно отражающими стенками в ячейке, совпадают с нашими расчетами, в которых использовались периодические граничные условия. Эти результаты приведены для сравнения на рис. 3, 7.

В работе [12] также сделана попытка рассчитать полную рекомбинацию полностью ионизированной плазмы. При этом подвергаются сомнению основные гипотезы статистической физики.

В связи с этим в работе [12] модифицируется физическая модель. В нее добавляется внешний фактор — термостатирующие стенки. При термостатирующих стенках частицы, достигающие стенок ячейки, возвращаются в объем со случайным направлением скорости и кинетической энергией, равной распределенной по Максвеллу температуре стенок. Выбор таких граничных условий приводит к изменению физической модели, так как раньше задача решалась в микроканоническом ансамбле, в котором сохраняется полная энергия системы, а в этом случае полная энергия уменьшается по мере установления равновесия в системе. С нашей точки зрения такой способ стимулирования рекомбинацион-



ных процессов не очень удачен, потому что приводит к искажению понимания физической картины. Создается ощущение, что размер ячейки влияет на результаты расчета. Методически правильнее было бы учесть процесс стохастизации дополнительным членом в уравнениях движения частиц.

В работе [12] был, как нам кажется, найден ответ на вопрос, почему в рамках микроканонического ансамбля при расчетах процесс рекомбинации не идет до конца. Это обусловлено выбором начальных условий для импульсов частиц. Оказывается, что если в процессе счета их некоторое число раз случайным образом поменять, но сохранить распределение по Максвеллу, то можно обеспечить процесс рекомбинации. Эта процедура была проделана и была получена функция распределения, которая в области отрицательных энергий описывает процессы рекомбинации. Однако авторы отказались от этого варианта ввиду большого объема вычислений на начальном участке расчетов.

Возможно, что при решении задачи полной рекомбинации и существуют проблемы, связанные с эргодической гипотезой, но мы в своей работе ограничились только изучением частичной рекомбинации. Нас интересовала область энергий  $-2 \leq E/T \leq 0$ , т. е. та область энергий электрона, где движение частиц является классическим и которая ограничена энергией «узкого горла». При этом, если в работе [12], где  $T$  достигает 25000 К, энергия связи, равная  $2T$ , далеко не соответствует квазиклассическому движению зарядов, то в нашем случае  $T \leq 50$  К и энергия связи соответствует главному квантовому числу электрона в атоме водорода,  $n \geq 40$ . В отличие от работы [12] нам удалось осуществить расчеты в области  $\gamma = 0.1-1$ .

Совпадение наших результатов с полученными в работе [12] свидетельствует о том, что они зависят только от кулоновского параметра взаимодействия и слабо зависят (или не зависят) от параметра столкновения, во всяком случае до  $\gamma^3 = 0.1$  (результаты [12] получены в области  $\gamma^3 \leq 0.06$ ).

В дальнейшем мы намерены провести расчеты коэффициента тройной рекомбинации в области  $\epsilon \geq -2$  методом молекулярной динамики.

В заключение хотелось бы сказать, что из экспериментов [9, 10, 13] трудно получить подтверждение наших результатов. Это связано с тем, что те данные, которые опубликованы, недостаточны. Мы

полагаем, что если продолжить эти эксперименты, можно получить много дополнительной информации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 06-02-16845, 05-02-17215, 08-02-01328), гранта Президента РФ МК-7383.2006.2, а также программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Исследование вещества в экстремальных состояниях».

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
2. G. Ecker and W. Kroll, *Z. Naturforschung* **21a**, 2023 (1966).
3. H. Gundel, *Beitr. Plasma Phys.* **10**, 455 (1970).
4. В. С. Воробьев, *ТВТ* **13**, 245 (1975).
5. А. С. Каклюгин, Г. Э. Норман, *ТВТ* **25**, 209 (1987).
6. I. Shimamura and T. Fujimoto, *Phys. Rev. A* **42**, 2346 (1990).
7. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, *ТМФ* **26**, 364 (1976).
8. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, *Физика плазмы* **3**, 885 (1977).
9. T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4776 (1999).
10. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3759 (2001).
11. A. A. Bobrov, E. A. Manykin, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, *Laser Phys.* **17**, 15 (2007).
12. С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. Н. Яковленко, *УФН* **164**, 297 (1994).
13. S. Kulin, T. C. Killian, S. D. Bergeson et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 318 (2000).
14. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *ДАН* **296**, 577 (1987).
15. И. Т. Якубов, *ТВТ* **30**, 862 (1992).
16. Y. Hahn, *Phys. Lett. A* **293**, 266 (2002).