

# ТЕРМОДИНАМИКА И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ РИДБЕРГОВСКОЙ ПЛАЗМЫ

*М. Бониц*<sup>a\*</sup>, *Б. Б. Зеленер*<sup>b\*\*</sup>, *Б. В. Зеленер*<sup>b</sup>,  
*Э. А. Маныкин*<sup>c</sup>, *В. С. Филинов*<sup>d</sup>, *В. Е. Фортков*<sup>d</sup>

<sup>a</sup> *Christian-Albrechts Universität zu Kiel Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Lehrstuhl Statistische Physik  
24098, Kiel, Germany*

<sup>b</sup> *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

<sup>d</sup> *Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур  
Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 октября 2003 г.

Предложена псевдопотенциальная модель для описания термодинамики и корреляционных функций ультрахолодной сильно неидеальной ридберговской плазмы. Методом Монте-Карло получены значения для энергии, давления и корреляционных функций в области температур  $T = 0.1\text{--}10$  К и концентрации  $n = 10^{-2}\text{--}10^{16}$  см<sup>-3</sup>. В слабо неидеальной плазме результаты совпадают с дебаевской асимптотикой. В области сильной неидеальности обнаружено возникновение многочастичных кластеров, а также пространственной упорядоченности в расположении электронов и ионов плазмы.

PACS: 32.80.Rm, 52.25.-b

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Уникальные экспериментальные работы [1–3] дали нам возможность узнать некоторые физические свойства плотного ионизованного газа при криогенных температурах. До сих пор процесс создания плотного ионизованного газа традиционно осуществлялся при высоких температурах и больших давлениях.

В работах [1–3], в которых изучалась плазма Хе, в разряде получали около  $5 \cdot 10^6$  метастабильных атомов Хе (уровень  $6S[3/2]_2$ , время жизни 43 с), затем их замедляли с использованием зеемановской техники, собирали в магнитооптическую ловушку и радиационно охлаждали на переходе  $6S[3/2]_2\text{--}6P[5/2]_3$

( $\lambda_1 \approx 882$  нм) до температуры 100 мкК. Максимальная плотность атомов достигала  $5 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup>, при этом распределение по плотностям было гауссовым со среднеквадратичным радиусом  $\sigma \approx 180$  мкм.

Для создания плазмы больше 20 % атомов было фотоионизовано в течение 10 нс. Сначала заселялся уровень  $6P[5/2]_3$  ( $\lambda_1 \approx 882$  нм), а затем атом ионизовался фотонами с длиной волны  $\lambda_2 \approx 514$  нм. Разница энергий между энергией фотона и потенциалом ионизации  $\Delta E$  распределялась между электронами и ионами. Причем из-за малой величины отношения массы электрона к массе иона только энергию, равную  $4 \cdot 10^{-6} \Delta E$  получали ионы, а все остальное — электроны. В работах [1–3] величину  $\Delta E/k$  меняли контролируемым образом от 0.1 К до 1000 К. Максимальная концентрация заряженных частиц составила

\*Michael Bonitz

\*\*E-mail: bobozel@mail.ru

$$n = n_e + n_i = 2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}.$$

В работах [1–3] было обнаружено аномальное замедление рекомбинации в полученной плазме. Время рекомбинации составляло порядка 100 мкс. Время рекомбинации, оцененное с помощью формулы, справедливой для разреженной плазмы, составляет наносекунды, что на много порядков меньше наблюдаемого.

Заметим, что полученная плазма является сильно неидеальной. В ней отношение средней потенциальной энергии частиц к кинетической энергии (параметр взаимодействия)  $\gamma = \beta e^2 n^{1/3}$  (где  $\beta = 1/kT$  — обратная температура,  $e$  — заряд электрона) существенно больше единицы. Так, при  $T = 0.1 \text{ К}$ ,  $n = 2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$  имеем  $\gamma = 21$ . В то же время электроны в этой плазме невырождены. Отношение «тепловой» длины волны де Бройля электрона  $\lambda_e$  к среднему расстоянию между частицами (параметр вырождения) при  $T = 0.1 \text{ К}$  и  $n = 2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$  существенно меньше единицы:

$$n^{1/3} \lambda_e = \frac{n^{1/3} \hbar}{\sqrt{2m_e kT}} = 0.2 \cdot 10^{-2}. \quad (1)$$

Здесь  $m_e$  — масса электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка.

В сильно неидеальной плазме при таких параметрах взаимодействия  $\gamma$  неприменимы оценки каких-либо процессов, основанные на формулах, полученных в приближении  $\gamma \ll 1$ .

## 2. УСТАНОВЛЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ

В работах [1–3] на основании свойств неидеальной плазмы [4] сделан вывод о том, что термическое равновесие устанавливается через десятки микросекунд. Нам этот вывод представляется неоправданным, так как в работе [4] рассматривается слабо неидеальная плазма, для которой  $\gamma \ll 1$ . Для значений  $\gamma \geq 1$  количественная кинетическая теория отсутствует, а потому могут быть сделаны только качественные оценки. При этом, если исходить из общих физических соображений, время установления термического равновесия в сильно взаимодействующей системе (например, при заданной температуре  $T$  с изменением концентрации частиц  $n$ ) должно быть меньше, чем в слабо взаимодействующей.

Для оценки времени термической релаксации в

газе электронов и ионов воспользуемся известным выражением [5] для случая  $\gamma \ll 1$  и  $n\lambda^3 \ll 1$ :

$$\tau_{ei}^\varepsilon = \frac{T_e^{3/2} M}{8n_i z^2 e^4 (2\pi m_e)^{1/2}} \frac{1}{L_e}. \quad (2)$$

Здесь  $T_e$  — температура электронов,  $M$  — масса иона,  $z$  — заряд иона,  $n_i$  — концентрация ионов,  $L_e$  — кулоновский логарифм:

$$L_e = \ln \left( \frac{a T_e}{z e^2} \right) = \ln \frac{1}{2\sqrt{\pi} \gamma^{3/2}} \left( \frac{z e^2}{\hbar v_{Te}} \gg 1 \right), \quad (3)$$

$v_{Te}$  — скорость электрона, соответствующая  $T_e$ ,

$$a = \frac{1}{\sqrt{4\pi n_e \beta e^2}} \quad (4)$$

— радиус Дебая.

Если плазма электронейтральна, то  $n_e = n_i$ . Выражение (2) содержит кулоновский логарифм  $L_e$ , который не имеет физического смысла в случае  $\gamma \geq 1$ . Кулоновский логарифм  $L_e$  возникает в этой формуле при вычислении транспортного сечения. Обычно оно определяется в разреженном случае для  $a \geq \bar{n}$  (где  $\bar{n}$  — среднее значение концентрации). Однако ясно, что транспортное сечение всегда имеет смысл и является конечным.

Аналогично для случая  $\gamma \geq 1$  оценку  $\tau_{ei}^\varepsilon$  времени термической релаксации с помощью характерных физических величин можно представить в виде (2), только при этом  $L_e$  следует заменить на  $L_e^*$  (эффективный кулоновский логарифм, учитывающий коллективные эффекты в неидеальной плазме):

$$\tau_{ei}^\varepsilon = \frac{(\tau_{ei}^\varepsilon)_0}{L_e^*}, \quad (5)$$

где

$$(\tau_{ei}^\varepsilon)_0 = \frac{T_e^{3/2} M}{8n_i z^2 e^4 (2\pi m_e)^{1/2}},$$

$(\tau_{ei}^\varepsilon)_0 = 3.4 \cdot 10^{-2} \text{ с}$  при  $T_e = 0.1 \text{ К}$  и  $n_i = 10^4$ ,  $z = 1$  ( $\gamma = 0.67$ ,  $M = 131.3 \text{ ат.ед.}$ ). При  $T_e = 0.1 \text{ К}$  и  $n_i = 10^{10}$  имеем  $(\tau_{ei}^\varepsilon)_0 = 34 \text{ нс}$ .

Мы предполагаем также, что дифференциальное сечение рассеяния остается кулоновским, но либо возникают поправки к нему, либо изменяются пределы интегрирования. Однако при этом зависимость времени релаксации от  $n$  при  $T = \text{const}$  останется логарифмической.

Величина  $\tau_{ei}^\varepsilon$  может измениться за счет замены  $L_e$  на  $L_e^*$  не более чем в 10–20 раз. Все эти рассуждения, конечно, должны быть подтверждены строгими оценками или численными расчетами. На основании сказанного выше можно считать, что термическое равновесие при  $T = 0.1 \text{ К}$  и  $n = 10^9$ – $10^{10}$  наступает за время меньше 1 мкс.

### 3. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ИЗУЧЕНИЮ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ РИДБЕРГОВСКОЙ ПЛАЗМЫ

Плазма Хе, полученная в экспериментах [1–3], состоит из однозарядных ионов Хе, электронов и высоковозбужденных ( $n > 100$ ) водородоподобных состояний Хе. Эти состояния называют ридберговскими. В работе [6] была впервые рассмотрена возможность существования конденсированных возбужденных состояний вещества. В настоящее время это конденсированное состояние вещества для ридберговских атомов (так называемое ридберговское вещество) подробно изучено теоретически [7, 8] и экспериментально [9–11]. В дальнейшем эта идея была развита в ряде работ (см. обзор [12]). Согласно этому подходу взаимодействие ридберговских атомов при увеличении их плотности приводит в конечном счете к изменению фазового состояния системы и качественному изменению всех характеристик. Более того, в отличие от свободных ридберговских атомов, время жизни которых в возбужденном состоянии составляет около 10 нс, время жизни ридберговского вещества оказывается макроскопически большим. Несмотря на малую плотность, являющуюся газовой по своим параметрам, конденсированное возбужденное состояние — это метастабильное упорядоченное состояние вещества. В настоящее время существует ряд экспериментальных результатов [13, 14] для цезиевой плазмы при  $T = 500 \text{ К} - 1000 \text{ К}$ , указывающих на существование ридберговского вещества.

В работах [15, 16] была установлена корреляция экспериментальных данных [13, 14] с представлениями об изолированной области метастабильных состояний переохлажденной неидеальной плазмы. В работах [6, 12] для получения ридберговского вещества использовались методы физики твердого тела в предположении наличия электронной ферми-жидкости. В работах [17, 18] численными методами было рассчитано время рекомбинации плотной плазмы и показано, что оно существенно выше, чем для слабо неидеальной плазмы. В работах [19, 20] был предложен другой подход для изучения термодинамики ридберговского вещества в случае, если газ электронов является невырожденным. Этот подход использует ранее разработанные методы для сильно неидеальной невырожденной плазмы [21].

Мы рассматриваем термодинамически равновесное состояние неидеального газа электронов и ионов ( $\gamma \geq 1$ ). Особенностью этого газа является то, что в нем полностью отсутствует атомный дискрет-

ный спектр или существуют дискретные состояния с  $n \geq n^*$ , где  $n^* = 100$  и выше. Поскольку  $n^* \geq 100$ , можно говорить о ридберговских состояниях. Строго говоря, в нашем случае нет полного термодинамического равновесия. Поэтому, когда мы говорим о термодинамически равновесных степенях свободы, мы, прежде всего, имеем в виду поступательные степени свободы. Термодинамическое равновесие всех остальных степеней свободы: (вращательные, колебательные, диссоциация и химические реакции, ионизация и электронное возбуждение) возникает значительно позже. Можно считать, что в легко возбуждаемых степенях свободы равновесие существует каждый момент, а медленные релаксационные процессы вообще не идут на протяжении рассматриваемого времени. Для описания такого газа мы воспользуемся результатами работ [21–29].

### 4. ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ И ГРАНИЦЫ ЕЕ ПРИМЕНИМОСТИ

Термодинамика равновесной квантовомеханической системы полностью определена, если известна статистическая сумма

$$Z_N \approx \text{Sp} \left( \exp \left( -\beta \hat{H} \right) \right) = \int_{V^N} \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n) dq_N, \quad (6)$$

где  $\text{Sp} \left( \exp \left( -\beta \hat{H} \right) \right)$  — шпур матрицы плотности  $\exp \left( -\beta \hat{H} \right)$ , а  $\psi_n(q_N)$  и  $E_n$  — волновые функции и уровни энергии  $N$  частиц,  $\hat{H}$  — гамильтониан системы  $N$  частиц,  $q_N$  — координаты  $N$  частиц,  $V$  — объем системы.

В работах [25–29] был развит подход, позволяющий описать термодинамические свойства плотной плазмы в широком диапазоне параметров неидеальности и вырождения, включая область сильной неидеальности и вырождения. Однако для невырожденной плазмы можно воспользоваться более простым подходом, развитым в работах [21–24], где была предложена псевдопотенциальная модель для расчета статистической суммы неидеальной невырожденной плазмы. Она связана с рассмотрением суммы Слэтера

$$S_N = N! \lambda^{3N} \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n), \quad (7)$$

где  $\lambda$  — тепловая длина волны частицы.

Суть псевдопотенциальной модели заключается в том, что сумма (7) представляется в виде произведения парных электрон-электронных, ион-ионных и электрон-ионных слэтеровских сумм:

$$S_{N_e+N_i} = \prod_{i<j=1}^{2N} S_{ij} = \prod_{i<j=1}^{N_e} S_{ee} \times \prod_{i<j=1}^{N_i} S_{ii} \prod_{i<j=1}^{N=N_i=N_e} S_{ei}. \quad (8)$$

В рассматриваемых экспериментальных условиях это приближение справедливо не только для  $\gamma < 1$ , но и для  $\gamma \geq 1$ , так как в газе Хе отсутствуют как парные, так и многочастичные связанные состояния. По аналогии с классическим случаем, произведение (8) можно заменить выражением

$$S_{N_i+N_e} = \exp\left(-\beta \sum_{ij} U_{ij}\right), \quad (9)$$

где

$$U_{ij} = -\frac{\ln S_{ij}}{\beta} \quad (10)$$

— псевдопотенциал.

Парные слэтеровские суммы в случае электрон-ионных, электрон-электронных и ион-ионных взаимодействий могут быть рассчитаны точно. При этом выражение для псевдопотенциала на больших расстояниях совпадает с законом Кулона, а на малых расстояниях псевдопотенциал конечен и зависит от температуры.

#### 4.1. Электрон-ионный псевдопотенциал

В случае взаимодействия электрона с ионом псевдопотенциал  $\Phi_{ei}$  определяется следующим образом:

$$\exp(-\beta\Phi_{ei}(r, T)) = S_{ei} = 8\pi^{3/2}\lambda_{ei}^3 \sum_{E_\alpha=E_0}^{\infty} |\Psi_\alpha(r)|^2 \exp(-\beta E_\alpha), \quad (11)$$

где  $S_{ei}$  — двухчастичная сумма Слэтера,  $E_\alpha(r)$  и  $\Psi_\alpha(r)$  — энергия и волновая функция электрона в поле иона в состоянии  $\alpha$ ,  $\lambda_{ei} = \lambda_e/\sqrt{2}$ . Суммирование проводится по всем возможным состояниям  $E_\alpha$ . Этот псевдопотенциал имеет конечное значение при  $r = 0$ , а на больших расстояниях выражение для него совпадает с законом Кулона.

Для плазмы в случае отсутствия связанных состояний до  $n = n_0$  можно записать выражение для  $S_{ei}(r, T)$  в следующем виде [21]:

$$S_{ei}(r, T) = S_d + S_c, \quad (12)$$

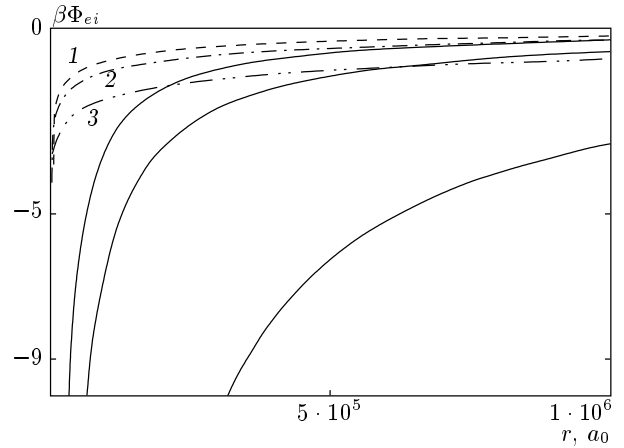


Рис. 1. Ион-электронные псевдопотенциалы при различных температурах  $T = 1$  К (1), 0.5 К (2), 0.1 К (3) в сравнении с кулоновскими потенциалами (сплошные линии)

где

$$S_d = 8\pi^{3/2}\lambda_{ei}^3 \sum_{E_\alpha=E_0}^{E'} |\psi_\alpha(r)|^2 \exp(-\beta E_\alpha) \quad (13)$$

— вклад части дискретного спектра от  $E_0$  до  $E'$ , который можно вычислить по известным волновым функциям  $\Psi_\alpha(r)$  для атома водорода, а вклад остальной части спектра составляет

$$S_c(z, T) = \exp\left(-\frac{\beta e^2}{r}\right), \quad (14a)$$

если

$$\frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} \geq \frac{|\beta e^2|}{\lambda_{ei}},$$

и

$$S_c(r, T) = \left[1 - y\left(\sqrt{\beta E' + \frac{\beta e^2}{r}}\right)\right] \exp\left(-\frac{\beta e^2}{r}\right) + 2\pi^{-1/2} \left(\beta E' + \frac{\beta e^2}{r}\right)^{1/2}, \quad (14b)$$

если

$$\frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} < \frac{|\beta e^2|}{\lambda_{ei}}.$$

Здесь

$$y(z) = 2\pi^{-1/2} \int_0^z \exp(-t^2) dt.$$

Сумма  $S_c(r, T)$  получена в квазиклассическом приближении для связанных состояний при  $E_\alpha > E'$  и состояний непрерывного спектра.

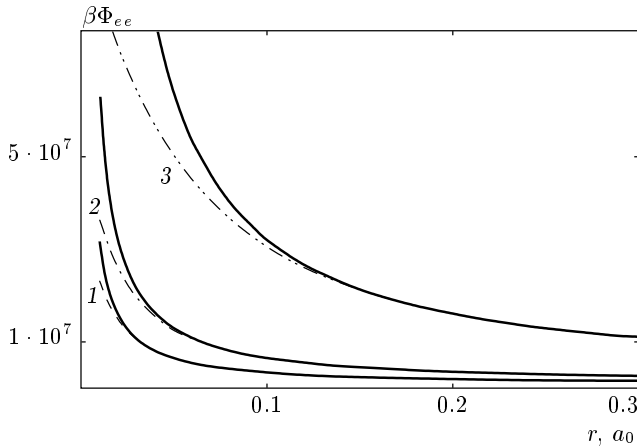


Рис. 2. Электрон-электронные псевдопотенциалы при различных температурах  $T = 1$  К (1), 0.5 К (2), 0.1 К (3) в сравнении с кулоновскими потенциалами (сплошные линии)

Выражения (13) и (14) в случае  $|\beta e^2/\lambda_{ei}| > 1$  при  $r = 0$  принимают вид

$$S_d\left(0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}\right) \approx \pi^{1/2} \left(\frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}\right)^3 n_0^{-3} \exp\left(\frac{\beta e^2}{n_0^3}\right), \quad (15)$$

$$S_c\left(0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}\right) \approx 2\pi^{1/2} \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}.$$

При  $n_0 \geq 100$  для определения потенциала  $\Phi_{ei}(r, T)$  достаточно воспользоваться (14) и (15) и использовать водородные волновые функции и уровни энергии. Для иона Хе при определении  $\Phi_{ei}(r, T)$  нужно также учесть конечность его размера (его кристаллографический радиус составляет около 2 Å). На рис. 1 приведены электрон-ионные псевдопотенциалы при  $T = 0.1, 0.5$  и 1 К, а также для сравнения кулоновский потенциал.

#### 4.2. Электрон-электронный и ион-ионный псевдопотенциалы

Слэтеровская сумма для взаимодействия двух электронов имеет вид [21]

$$\begin{aligned} S_{ee}(r, T) &= \\ &= 16\pi^{3/2}\lambda_{ee}^3 \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(r, \sigma_1, \sigma_2)|^2 \exp(-\beta E_{\alpha}) \equiv \\ &\equiv \exp(-\beta\Phi_{ee}(r, T)). \end{aligned} \quad (16)$$

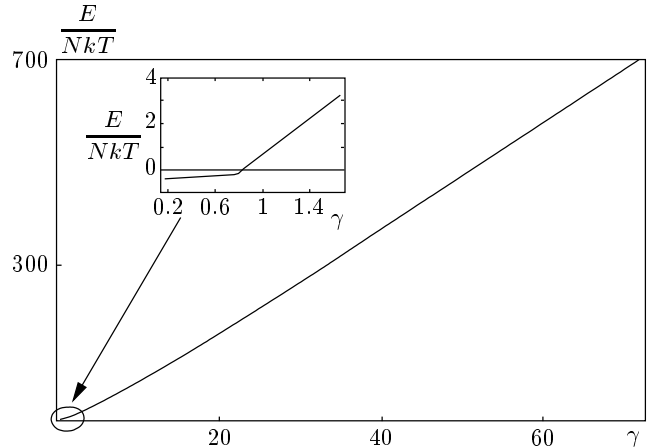


Рис. 3. График зависимости внутренней энергии на одну частицу  $E/NkT$  от параметра неидеальности  $\gamma$

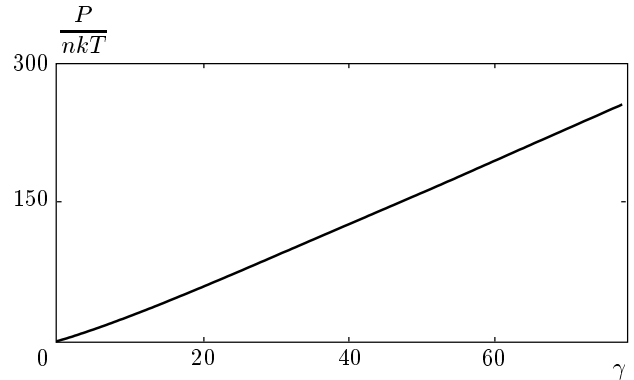


Рис. 4. График зависимости давления  $P/nkT$  от параметра неидеальности  $\gamma$

Волновые функции, входящие в выражение (16), зависят от спинов электронов  $\sigma_1, \sigma_2$  и должны быть антисимметричны. Заметим, что выражение (16) можно записать как сумму вкладов от волновых функций с симметричными и несимметричными частями:

$$\begin{aligned} S_{ee}(r, T) &= \frac{1}{4}S_{ee}^c(r, T) + \frac{3}{4}S_{ee}^a(r, T) \equiv \\ &\equiv \exp(-\beta\Phi_{ee}(r, T)). \end{aligned} \quad (17)$$

Численные расчеты потенциала  $\Phi_{ee}(r, T)$  были проведены в работе [22] в широком диапазоне температур  $T = 10^2-10^5$  К. Там же было предложено следующее аппроксимационное выражение для потенциалов  $\Phi_{ee}(r, T)$ :

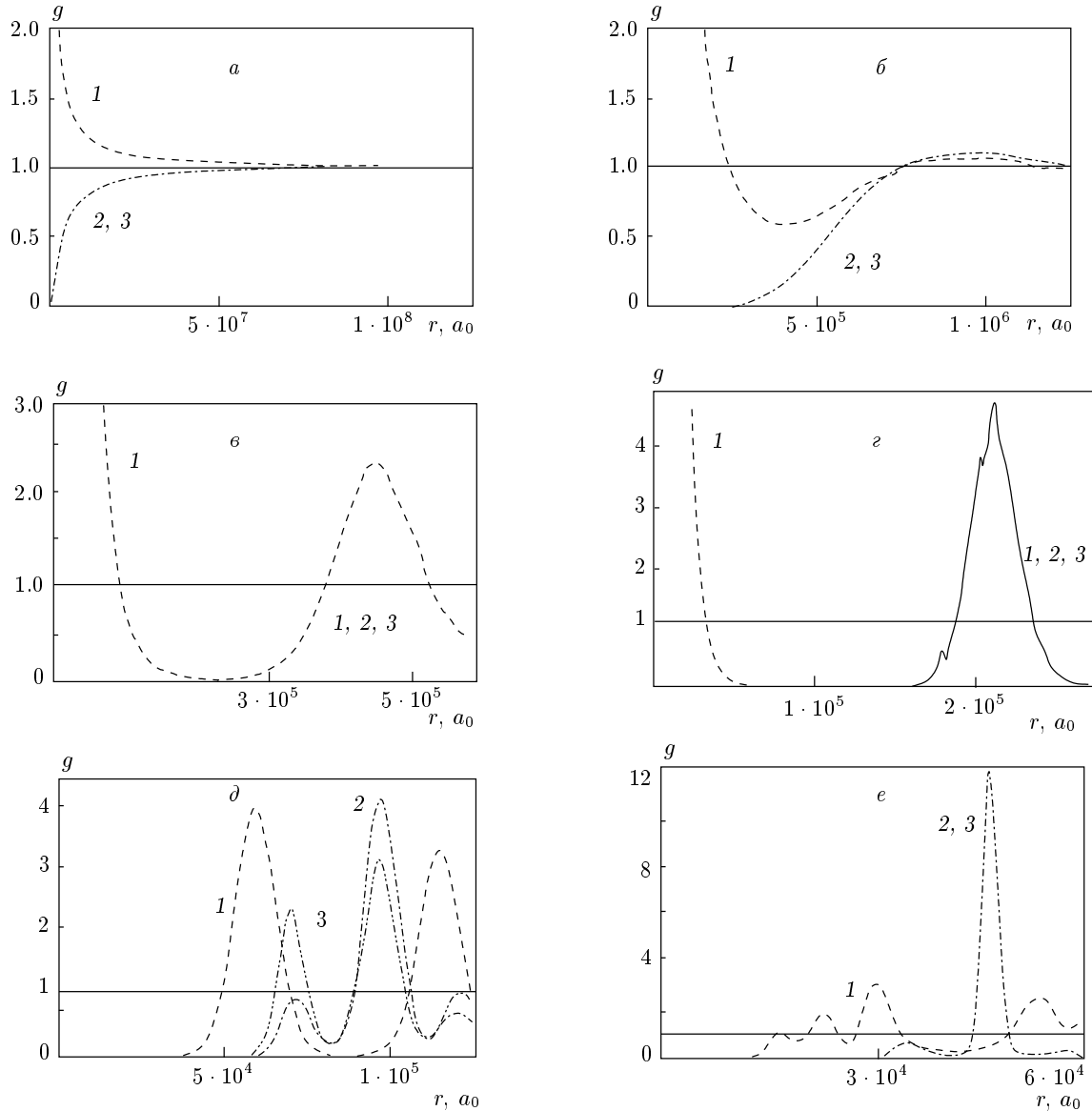


Рис. 5. Графики корреляционных функций при различных плотностях и температуре  $T = 0.1$  К: 1 —  $g_{ei}(r)$ , 2 —  $g_{ee}(r)$ , 3 —  $g_{ii}(r)$ ; а —  $n = 10$ ,  $\gamma = 0.036$ ; б —  $n = 10^7$ ,  $\gamma = 3.6$ ; в —  $n = 10^8$ ,  $\gamma = 7.7$ ; г —  $n = 10^9$ ,  $\gamma = 16.7$ ; д —  $n = 10^{10}$ ,  $\gamma = 36$ ; е —  $n = 10^{11}$ ,  $\gamma = 77$

$$\Phi_{ee}(r, T) = \frac{2}{r} (1 - \exp(-8.35 \cdot 10^{-4} r T^{0.625})), \quad (18)$$

$$\Phi_{ee}(0, T) = 16.7 \cdot 10^{-4} T^{0.625},$$

где  $r$  измеряется в  $a_0$ ,  $T$  — в кельвинах, а  $\Phi_{ee}$  — в ридбергах ( $Ry = 0.5me^4/\hbar^2$ ).

На больших расстояниях выражение (18) совпадает с законом Кулона. При  $\beta e^2/\lambda_{ee} > 1$  выражение (17) при  $r = 0$  можно записать [23] в виде

$$S_{ee} \left( 0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}} \right) \approx \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} \left( \frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}} \right)^{4/3} \times \left( \frac{\pi}{2} \right)^{1/3} \exp \left( -3 \left( \frac{\pi \beta e^2}{2\lambda_{ee}} \right)^{2/3} \right). \quad (19)$$

Таким образом, в случае  $\beta e^2/\lambda_{ee} > 1$  аппроксимацией (18) можно пользоваться до  $T = 0.1$  К.

На рис. 2 приведены электрон-электронные псевдопотенциалы при  $T = 0.1, 0.5$  и 1 К, а также для сравнения кулоновский потенциал.

Выражения для ион-ионных псевдопотенциалов, согласно [21], совпадают с законом Кулона. Необходимо только учесть конечность размеров иона (например, кристаллографический радиус).

## 5. РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН И КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

### 5.1. Метод расчета

При псевдопотенциальном подходе квантовая статистическая сумма приводится к выражению, которое по форме является классическим [21]. Поэтому для определения соответствующих термодинамических величин можно применить все методы, разработанные в статистической термодинамике классических систем (как аналитические, так и численные).

Для расчета термодинамических свойств и корреляционных функций ридберговской ультрахолодной плазмы был использован метод Монте-Карло для многокомпонентной плазмы в каноническом ансамбле, развитый в работах [24, 25].

Определение различных термодинамических величин при этом сводится к вычислению средних значений от известных функций координат  $q$ . Например, для энергии имеем

$$\bar{E} = Q^{-1}(N, V, T) \int \dots \int_V E_N(q) S_N(a, T) d^N q, \quad (20)$$

где  $Q(N, V, T)$  — конфигурационный интеграл.

Метод Монте-Карло — это численный метод, использующий цепи Маркова [24]. Он позволяет выбирать лишь основные, наиболее типичные слагаемые, определяющие значения интегральной суммы. Поэтому иначе он называется методом существенной выборки. Другой особенностью метода является использование периодических граничных условий. Все трехмерное пространство разбивается на равные ячейки объема  $V$  с  $N$  частицами в каждой. Если одна из частиц ячейки вследствие изменения своих координат выходит из этой ячейки, то одновременно ее образ из соседней ячейки входит через противоположную грань и число частиц в ячейке сохраняется.

Погрешности результатов, полученных методом Монте-Карло [24], связаны с выбором числа частиц в ячейке и конечностью длины цепи Маркова. Для оценки погрешности выбора числа частиц были проделаны расчеты для различных  $N = 16, 32, 64$  и 128 и показана сходимость ( $\propto N^{-1}$ ). Оценка статистической погрешности, связанной с конечностью длины

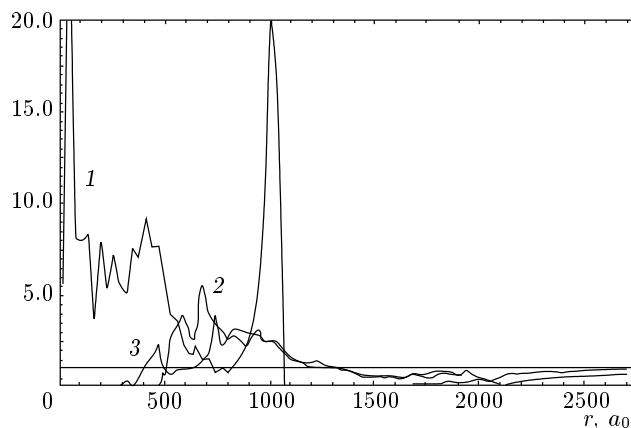


Рис. 6. Графики корреляционных функций при плотности  $n = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и температуре  $T = 10 \text{ К}$ :  
1 —  $g_{ei}(r)$ , 2 —  $g_{ee}(r)$ , 3 —  $g_{ii}(r)$

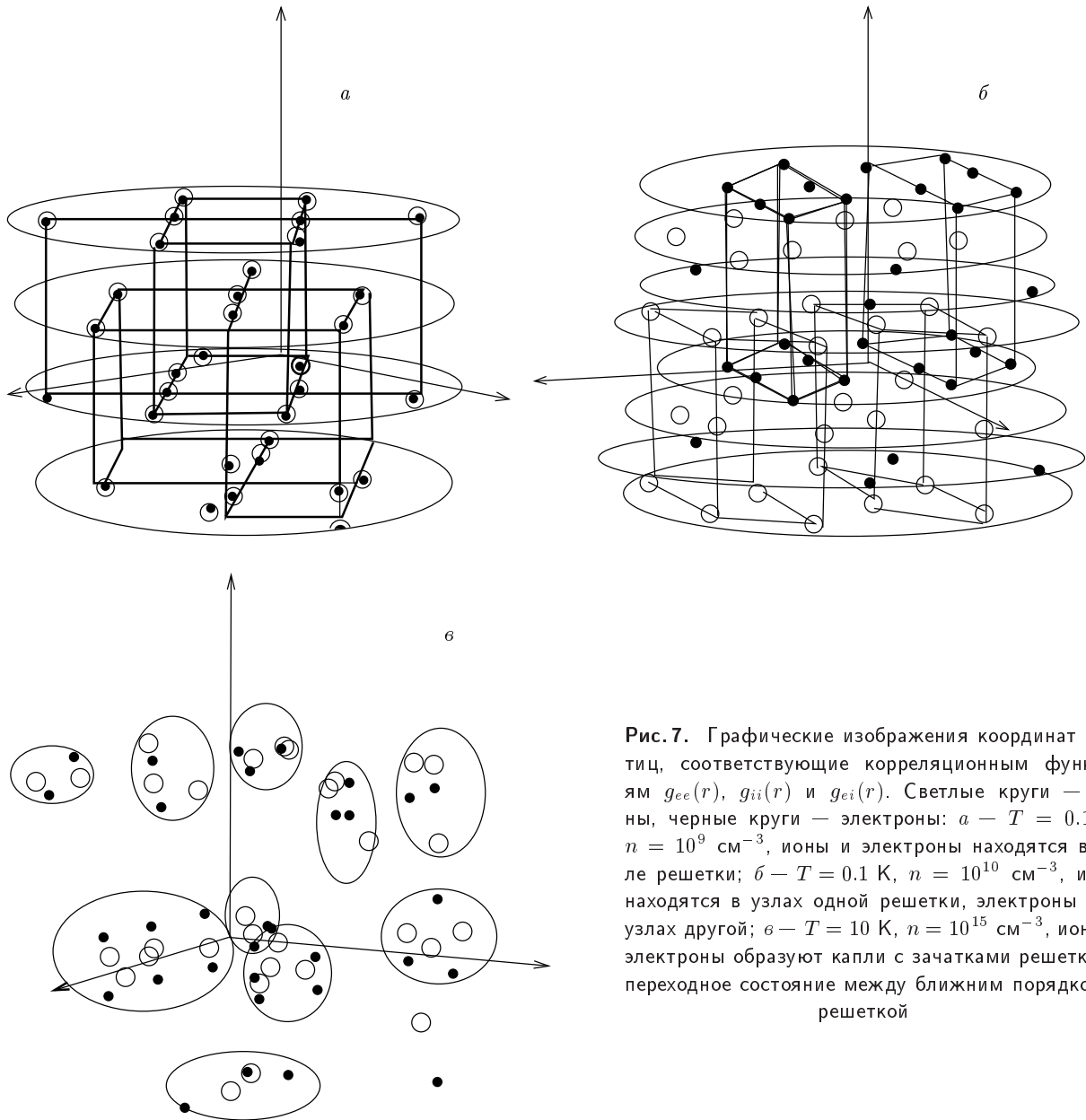
цепи Маркова [24], позволила выбирать цепи Маркова необходимой длины. Кроме того, выбрасывался неравновесный участок. Проводились также расчеты электрон-электронных  $g_{ee}(r)$ , ион-ионных  $g_{ii}(r)$  и электрон-ионных  $g_{ei}(r)$  радиальных корреляционных функций.

### 5.2. Результаты расчетов

Итак, мы рассматриваем псевдопотенциальную модель ультрахолодной ридберговской плазмы. На основании экспериментальных результатов эта плазма состоит из электронов, однозарядных ионов и атомов в высоковозбужденных состояниях ( $n > 100$ ). Низковозбужденные состояния ( $n < 100$ ) в этой плазме отсутствуют, так как она создана в результате лазерного возбуждения атомов на определенной длине волны, а также потому, что в эксперименте наблюдалось аномальное увеличение времени рекомбинации.

Нами были проделаны расчеты для области температур  $T = 0.1\text{--}10 \text{ К}$  и области концентраций  $n = 10^{-2}\text{--}10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Расчеты в области низких концентраций обусловлены необходимостью получить предельный переход при  $\gamma \ll 1$  к значениям, которые согласуются с приближением Дебая-Хюккеля (см., например, [21]).

На рис. 3 и 4 приведены значения внутренней энергии  $E/NkT$  на одну частицу и давления  $P/nkT$  в зависимости от параметра неидеальности  $\gamma$ . В пределе малых  $\gamma$  имеется согласие с приближением Дебая-Хюккеля (см. вставку на рис. 3). В области



**Рис. 7.** Графические изображения координат частиц, соответствующие корреляционным функциям  $g_{ee}(r)$ ,  $g_{ii}(r)$  и  $g_{ei}(r)$ . Светлые круги — ионы, черные круги — электроны: *a* —  $T = 0.1$  К,  $n = 10^9$  см<sup>-3</sup>, ионы и электроны находятся в узле решетки; *б* —  $T = 0.1$  К,  $n = 10^{10}$  см<sup>-3</sup>, ионы находятся в узлах одной решетки, электроны — в узлах другой; *в* —  $T = 10$  К,  $n = 10^{15}$  см<sup>-3</sup>, ионы и электроны образуют капли с зачатками решетки — переходное состояние между ближним порядком и решеткой

$\gamma < 0.5$  безразмерная энергия  $E/NkT$  выходит на дебаевское значение

$$\frac{E}{NkT} = -\sqrt{\pi} \gamma^{3/2}. \quad (21)$$

На рис. 5, 6 приведены корреляционные функции  $g_{ee}(r)$ ,  $g_{ii}(r)$  и  $g_{ei}(r)$  для различных плотностей и температур  $T = 0.1$  и  $10$  К, соответственно. В случае  $\gamma \ll 1$  наблюдается хорошее согласие с приближением Дебая–Хюккеля (линеаризованным или нелинеаризованным). При  $\gamma \geq 1$  вид корреляционных функций указывает на образование ближнего

порядка среди частиц как одного, так и разных знаков. При росте  $\gamma$  этот порядок усиливается. Максимумы корреляционных функций растут, а минимумы обращаются в нуль, что связано с формированием строгого порядка в пространственном расположении частиц. В области нулевых значений корреляционных функций частицы практически отсутствуют.

Для того чтобы лучше понять ситуацию, связанную с установлением порядка при росте  $\gamma$ , использовалась программа визуализации. Она позволяет увидеть расположение частиц в различных равно-



весных конфигурациях. На рис. 7а-в приведены отдельные равновесные конфигурации для различных  $T$  и  $n$ .

Обсудим результаты для изотермы  $T = 0.1$  К. С увеличением плотности возникает порядок, который соответствует решетке размером  $L = 2.2 \cdot 10^5 a_0$  при  $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$  (рис. 5г и 7а). В узлах решетки находятся пары электронов и ионов на расстоянии  $r = 2.2 \cdot 10^5 a_0$ . С увеличением плотности до  $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$  (рис. 5д и 7б) электроны и ионы, образующие пару, расходятся и образуются две решетки: электронная и ионная. Это говорит, по-видимому, о том, что первоначальная решетка, в узлах которой находились пары, — это две решетки, вложенные друг в друга.

При увеличении температуры формирование упорядоченной структуры смещается в сторону увеличения плотности частиц. Так, для  $T = 10$  К при существенно большей плотности  $n = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  устанавливается только лишь ближний порядок в виде электрон-ионных кластеров (что видно из равновесной конфигурации), представленных на рис. 6 и 7в. Эти кластеры представляют собой сгустки (капли) разноименно заряженных частиц, причем в этих каплях электроны и ионы выстраиваются в минирешетки.

Как было отмечено выше, энергия  $E/NkT$  в области  $\gamma \geq 0.1$  в диапазоне  $T = 0.1-10$  К линейно зависит от  $\gamma$  (см. рис. 3). Это означает, что, исключив температуру из этой зависимости, мы получим выражение, аналогичное известному закону Маделунга для ионного кристалла [30]:

$$\frac{E}{N} = Ae^2 n^{1/3}, \tag{22}$$

где  $A = 8-9$  — константа (аналог постоянной Маделунга).

Как следует из расчетов, постоянная решетки пропорциональна  $n^{-1/3}$ . Вид выражения (22) говорит о том, что при  $\gamma \geq 1$  в полученном ионизованном газе устанавливается порядок, аналогичный кристаллической решетке, при этом энергия является функцией среднего расстояния между частицами, которое приблизительно равно постоянной решетки.

На рис. 8 приведена диаграмма  $n-T$ . Область параметров, соответствующая дебаевской плазме, обозначена крестиками, область, где возникают капли — квадратами, а область появления решетки — кружочками. Приведены также линии  $\gamma = 1$  и  $n\lambda^3 = 1$ . На диаграмме видно, что формирование ближнего порядка начинается только в области

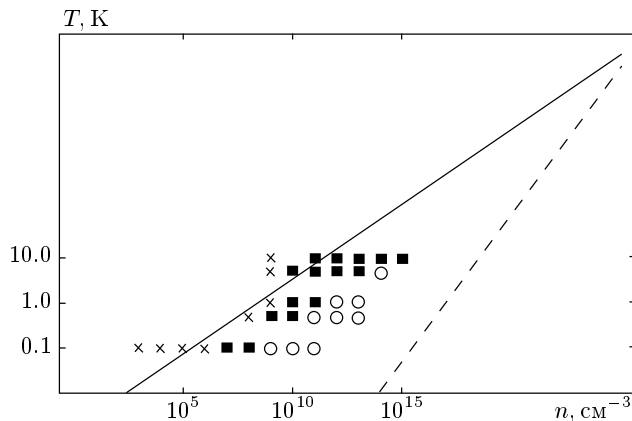


Рис. 8. Диаграмма  $n-T$ . Крестики соответствуют «газовому» состоянию плазмы, квадраты — «жидкому», кружки — «твердому» (решетка). Сплошная линия —  $\gamma = 1$ , штриховая линия —  $n\lambda^3 = 1$

$\gamma \approx 1$ , а при увеличении температуры, как было описано выше, формирование упорядоченной структуры смещается в сторону увеличения плотности частиц. Кроме того, в данных условиях формирование дальнего порядка возникает задолго до возникновения вырождения.

Полученные результаты также позволяют нам понять то, что авторы работ [1-3] называют anomalously замедленной рекомбинацией. В ионизованном газе при  $\gamma \geq 1$  отсутствуют ридберговские атомы, которые должны рекомбинировать, однако существует ближний (а при  $\gamma \gg 1$  — дальний) порядок для заряженных частиц как одного, так и разных знаков, что снижает вероятность сближения и рекомбинации частиц разных знаков.

### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы рассмотрели ридберговский ионизованный газ, сформированный из электронов и ионов непрерывного спектра. Была исследована область температур  $T = 0.1-10$  К и концентрации  $n = 10^{-2}-10^{16} \text{ см}^{-3}$ . В результате было обнаружено формирование структуры при  $\gamma \geq 1$ , что, по-видимому, приводит к замедлению рекомбинации, которое наблюдается в эксперименте. Формирование структуры происходит в области, в которой газ электронов далек от вырождения ( $n\lambda^2 \ll 1$ ), а сама структура меняется от ближнего (аналогично структуре в жидкости) до дальнего (аналогично решетке в твердых телах) порядка. Добавление в рассматриваемый газ состояний дискретного спектра

тра приведет к изменению свойств этого газа. При учете этих состояний для конкретных концентраций и температур энергия уменьшится, что может привести к изменению фазовой диаграммы.

Предложенная модель не содержит каких-либо конкретных характеристик элементов. Поэтому она может быть использована для газа любого элемента.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты №№ 02-02-16320, 04-02-17474).

## ЛИТЕРАТУРА

1. T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4776 (1999).
2. S. Kulin, T. C. Killian, S. D. Bergeson, and S. L. Rolston, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 318 (2000).
3. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3759 (2001).
4. L. Spitzer, Jr. *Physics of Fully Ionized Gases*, Wiley, New York (1962), p. 35.
5. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979), стр. 207.
6. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, *ДАН СССР* **260**, 1096 (1981).
7. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, *ЖЭТФ* **84**, 442 (1983).
8. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, *ЖЭТФ* **102**, 804 (1992).
9. C. Aman, J. B. C. Pettersson, and L. Holmlid, *Chem. Phys.* **147**, 189 (1990).
10. R. S. Svensson, L. Holmlid, and L. Lundgren, *J. Appl. Phys.* **70**, 1489 (1991).
11. C. Aman, J. B. C. Pettersson, H. Lindroth, and L. Holmlid, *J. Matter Res.* **7**, 100 (1992).
12. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, *Хим. физика* **18**, 88 (1999).
13. R. Svensson and L. Holmlid, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1739 (1999).
14. В. И. Ярыгин, В. Н. Сидельников, И. И. Касиков, В. С. Миронов, С. М. Тулин, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 330 (2003).
15. Г. Э. Норман, в сб. *Труды XVI междунар. конф. «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество»*, Черногловка, Московская обл., под ред. В. Е. Фортова, ИПХФ РАН (2001), стр. 110.
16. Г. Э. Норман, *Письма в ЖЭТФ* **73**, 13 (2001).
17. А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, *КЭ* **30**, 1077 (2000).
18. А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, *Письма в ЖЭТФ* **73**, 66 (2001).
19. Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, в сб. *Труды XVII междунар. конф. «Уравнения состояния вещества»*, Эльбрус, Кабардино-Балкарская респ., под ред. В. Е. Фортова, ИПХФ РАН, Черногловка (2002).
20. V. S. Filiniov, E. A. Manykin, B. V. Zelener, and B. V. Zelener, in *Proc. 12<sup>th</sup> Int. Laser Physics Workshop*, Hamburg (2003).
21. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике*, Наука, Москва, (1981), стр. 101.
22. A. A. Barker, *J. Chem. Phys.* **55**, 1751 (1971).
23. В. С. Воробьев, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *ЖЭТФ* **57**, 838 (1969).
24. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977), стр. 129.
25. V. S. Filiniov, M. Bonitz, W. Ebeling, and V. E. Fortov, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **43**, 743 (2001).
26. V. S. Filiniov, M. Bonitz, P. Levashov, V. E. Fortov, W. Ebeling, M. Schlanges, and S. W. Koch, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 6069 (2003).
27. В. С. Филинов, В. Е. Фортов, М. Бониц, П. Р. Левашов, *Письма в ЖЭТФ* **74**, 422 (2001).
28. В. С. Филинов, В. Е. Фортов, М. Бониц, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 361 (2000).
29. V. S. Filiniov, V. E. Fortov, M. Bonitz, and D. Kremp, *Phys. Lett.* **274**, 228 (2000).
30. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978), стр. 128.