

# СТОЛКНОВИТЕЛЬНАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

*А. В. Ланкин*\*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт  
141700, Московская обл., Долгопрудный, Россия*

Поступила в редакцию 28 июня 2007 г.

Предложена модель, позволяющая рассмотреть кинетику столкновительной рекомбинации в неидеальной плазме и вычислить в рамках метода молекулярной динамики ее скорость. Найдено, что зависимость скорости столкновительной рекомбинации от степени неидеальности плазмы существенно отличается от экстраполяции скорости трехчастичной рекомбинации в неидеальную область. Обнаружено снижение скорости рекомбинации в сильнонеидеальной плазме с увеличением степени ее неидеальности. Установлено увеличение влияния неидеальности плазмы по мере роста заряда ионов. Показана существенная зависимость кинетики рекомбинации от характера расположения ионов в среде. Столкновительная рекомбинация переходит в трехчастичную при уменьшении неидеальности среды.

PACS: 52.65.Yy, 52.27.Gr, 52.20.-j

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Плазма, используемая во многих приложениях, является неидеальной [1, 2]. Учет процесса рекомбинации важен для описания процессов, протекающих в неидеальной плазме, например, возникающей в кластерах под действием сильного лазерного излучения, причем основную роль в этом случае должна играть столкновительная рекомбинация [3, 4]. В работе [4] скорость рекомбинации оценивалась путем экстраполяции скорости трехчастичной рекомбинации [5] в идеальной плазме в неидеальную область. В работе [3] для ее оценки также использовалось приближение из работы [6].

Влияние степени неидеальности плазмы,  $\Gamma = (4\pi n_e/3)^{1/3} e^2/kT$  ( $n_e$  — концентрация электронов,  $e$  — заряд электрона), на скорость рекомбинации в различных приближениях рассматривалось в работах [6–11]. На основе анализа дрейфа Фоккера–Планка электронов по энергии в неидеальной плазме вычислялась скорость рекомбинации [6]. В рамках такого приближения авторы работы [6] приходят к выводу о существенном снижении

скорости рекомбинации в неидеальной плазме. Хотя этот качественный вывод подтверждается в других работах, количественные оценки скорости рекомбинации в [6] нельзя считать удовлетворительными, поскольку в этой работе не учитывается потеря стабильности части высоковозбужденных уровней, что, как было показано [7, 8], должно сильно сказываться на процессе рекомбинации в плазме. Важную роль в процессе рекомбинации должны играть микрополя плазмы. Структура микрополей в неидеальной плазме исследовалась в [12]. Детальный учет влияния электрических и магнитных полей на процесс рекомбинации был сделан в работе [9], где было показано сильное подавление рекомбинации через высоковозбужденные уровни при их учете в области сильнонеидеальной плазмы ( $\Gamma > 1$ ). Необходимо указать, что часть работ, в частности [8], где проводился расчет скорости рекомбинации в неидеальной плазме, основаны на принципе детального равновесия. При этом вероятности возбуждения уровней и ионизации полагались совпадающими со скоростями аналогичных процессов в идеальной плазме, что в случае сильнонеидеальной плазмы не очевидно.

\*E-mail: lankin@ihed.ras.ru

Кроме того, в работе [9] полагается, что высоковозбужденные уровни в неидеальной плазме заселены согласно условию Саха. Однако для сильнонеидеальной плазмы есть указания на то, что это не так [13]. Соответственно, имеющиеся в литературе теоретические оценки для скорости рекомбинации в случае сильнонеидеальной плазмы нуждаются в дополнительной проверке.

Процесс рекомбинации в неидеальной плазме изучался также и методом молекулярной динамики. По результатам молекулярно-динамических расчетов [10] было сделано предположение о возможности объяснения подавления рекомбинации в неидеальной плазме при условии отказа от принципа детального равновесия. В работе [10] были использованы зеркальные граничные условия, что могло вызвать сильные отклонения поведения плазмы в данной модели от ее поведения в реальной системе [14].

Методом молекулярной динамики (МД) рекомбинация в ультрахолодной плазме изучалась в работе [11]. Там рассматривался малый плазменный кластер с гауссовым распределением плотности и случайным расположением частиц. Последнее вело к тому, что в процессе релаксации изучаемого плазменного кластера существенную роль играли процессы, связанные с формированием корреляций между частицами. Кроме того, имел место процесс ухода из кластера быстрых электронов. В данной работе рассматривалась только однозарядная плазма.

Таким образом, в имеющихся в литературе работах по моделированию рекомбинации в неидеальной плазме в рамках метода молекулярной динамики рассматривалась только однозарядная плазма при достаточно специфических начальных и граничных условиях. В силу этого они требуют дальнейшего обобщения.

Сильное подавление рекомбинации в неидеальной плазме наблюдалось в экспериментах с ультрахолодной плазмой [15].

Неидеальная плазма является неудобным объектом для теории, так как сильное межчастичное взаимодействие затрудняет применение стандартных методов теоретической физики [1, 16]. При этом адекватный учет связанных состояний (возбужденных атомов) представляет собой одну из наиболее сложных проблем при описании неидеальной низкотемпературной плазмы.

Область состояний связанных пар, примыкающих к порогу ионизации и исчезающих под действием микрополей, занимает энергетический интервал порядка  $e^2 n_i^{1/3}$  ( $n_i$  — концентрация ионов), примыкающий снизу к пределу ионизации, и в сильнонеиде-

альной плазме в эту область попадает значительная часть возбужденных связанных состояний. Кроме того, часть сохраняющихся уровней перекрывается в силу штарковского уширения, образуя квазинепрерывный спектр. В силу этого оказывается естественным применить классический метод молекулярной динамики для изучения не только свободных, но и связанных состояний электронов и ионов в неидеальной плазме, т. е. рассматривать их совместно в рамках одного расчета. Кроме того, связанные пары, принадлежащие квазинепрерывному спектру, целесообразно отделять от пар, находящихся в дискретном спектре, рассматривая их как парные флуктуации [17]. В рамках метода молекулярной динамики могут изучаться только водородоподобные ионы, вопрос возможного влияния особенностей иона на скорость рекомбинации, когда он не является водородоподобным, изучался в работе [9]. Основные ограничения, накладываемые на параметры плазмы и связанных состояний, которые могут быть описаны в рамках классического метода молекулярной динамики, рассматривались в [17, 18].

В данной работе на основе МД-моделирования была вычислена скорость рекомбинации в сильнонеидеальной плазме в широком диапазоне параметров и сделан вывод о характере ее зависимости от степени неидеальности, заряда ионов, а также от их расположения в плазме. В разд. 2 дано описание используемой модели неравновесной плазмы. В разд. 3 рассмотрена зависимость скорости рекомбинации от степени неидеальности плазмы. В разд. 4 описывается зависимость скорости рекомбинации от заряда ионов, а также выводится общее аппроксимационное соотношение. В разд. 5 столкновительная рекомбинация через высоковозбужденные уровни сравнивается с иными механизмами рекомбинации. В разд. 6 затрагивается вопрос зависимости скорости рекомбинации от расположения частиц в плазме.

## 2. МОДЕЛЬ НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЫ

Особенности численной модели при моделировании неидеальной плазмы были описаны в работах [18, 19]. В данной работе, так же как и ранее [18], был использован ограниченный на некоторой глубине кулоновский потенциал, граничные условия полагались периодическими. Поскольку преимущественно рассматривается плазма с достаточно высокой степенью неидеальности, экранирование в ней происходит на расстоянии нескольких средних межчастичных расстояний, а это позволяет исполь-

зывать при моделировании сравнительно небольшое количество частиц (порядка нескольких сотен). Дальнейшее увеличение числа частиц нецелесообразно, и повышение точности расчета достигается усреднением по ансамблю конфигураций, полученных из независимых начальных условий [19]. Для диагностики электрон-ионных пар использовался алгоритм, описанный в работах [17, 18].

При рассмотрении неравновесных сред в рамках метода молекулярной динамики существенное значение имеет выбор начального состояния системы. В данном случае начальные условия для моделирования с целью вычисления скорости рекомбинации в неидеальной плазме создавались путем выполнения процедуры, состоящей из двух этапов.

1) Система приводилась в состояние равновесия.

2) В системе осуществлялся поиск связанных электрон-ионных пар согласно алгоритму, описанному в работе [18], а затем проводилось их исключение. Исключение пар путем изменения начального состояния электронов и ионов выполнялось следующим образом.

**а.** Строилась сравнительно короткая МД-траектория, на которой, согласно процедуре, описанной в [18], отыскивались связанные состояния, существовавшие в начальный момент времени.

**б.** Скорости частиц, образующих эти пары, увеличивались, а скорости оставшихся частиц уменьшались так, чтобы полная кинетическая энергия электронов сохранялась.

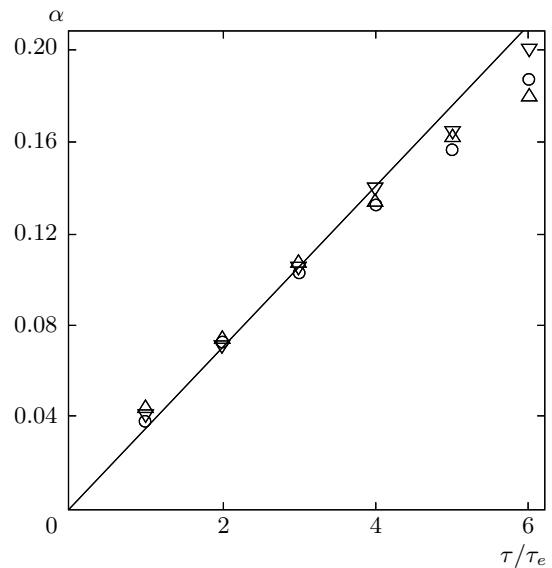
**в.** Полученное в результате процедуры **а, б** состояние использовалось в качестве начальных условий для процедуры **а**, после чего действия **а–в** повторялись.

Процедура **а–в** повторялась до тех пор, пока не удавалось получить начальные условия, не содержащие связанных электрон-ионных пар.

В дальнейшем проводился расчет МД-траектории и устанавливалась зависимость доли  $\alpha$  электрон-ионных пар (отношения числа пар к числу ионов) от времени. Эта зависимость оказалась близка к экспоненциальной, а частота рекомбинации  $K$  в этом случае вычислялась из производной зависимости доли пар в системе от времени:

$$K = \left. \frac{d\alpha}{d\tau} \right|_{\tau=0}. \quad (1)$$

На рис. 1 представлена зависимость доли электрон-ионных пар в системе от времени, вычисленная для различной глубины потенциала электрон-ионного взаимодействия. Начальный участок этой зависимости практически не зависит



**Рис. 1.** Начальный участок зависимости доли электрон-ионных пар от времени при релаксации системы из состояния без связанных пар ( $\Gamma = 1$ ); глубина потенциала электрон-ионного взаимодействия составляет  $5kT$  ( $\nabla$ ),  $10kT$  ( $\circ$ ),  $15kT$  ( $\Delta$ );  $\tau_e$  — период плазменных колебаний. Прямая линия нанесена для наглядности, чтобы показать зависимость доли пар от времени в начальный момент

от выбора глубины потенциала, что говорит о том, что скорость рекомбинации также не зависит от данного параметра.

На больших временах зависимость доли пар от времени начинает отклоняться от линейной, что обусловлено как накоплением пар в системе, так и разогревом плазмы в результате рекомбинации. Разогрев плазмы в результате рекомбинации ведет к тому, что отклонение от линейной зависимости оказывается больше при моделировании с использованием потенциала с большей глубиной, что также видно из рис. 1.

Независимость скорости рекомбинации от выбора глубины потенциала говорит о том, что скорость рекомбинации лимитируется областью энергий, занимаемой слабосвязанными парами, а также областью энергий, лежащей между областью электрон-ионных пар и областью свободных электронов. Данный вопрос более подробно рассмотрен в разд. 3.

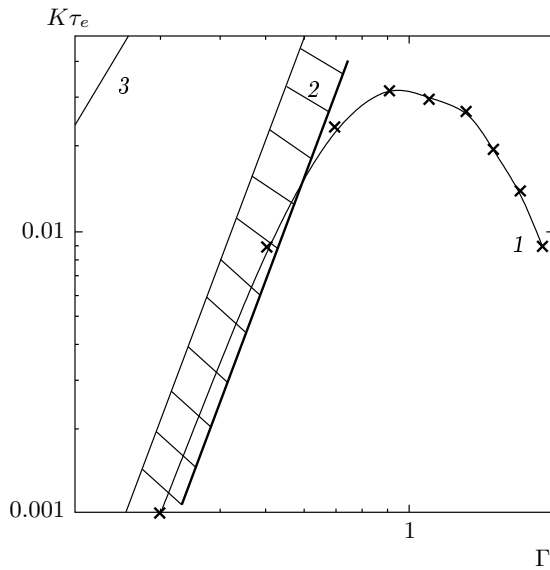


Рис. 2. Зависимость частоты рекомбинации от степени неидеальности плазмы при  $Z = 1$ : 1 — результаты МД-моделирования; 2 — возможная область значений для случая трехчастичной рекомбинации [5]; 3 — результат расчета с использованием соотношения из работы [6]

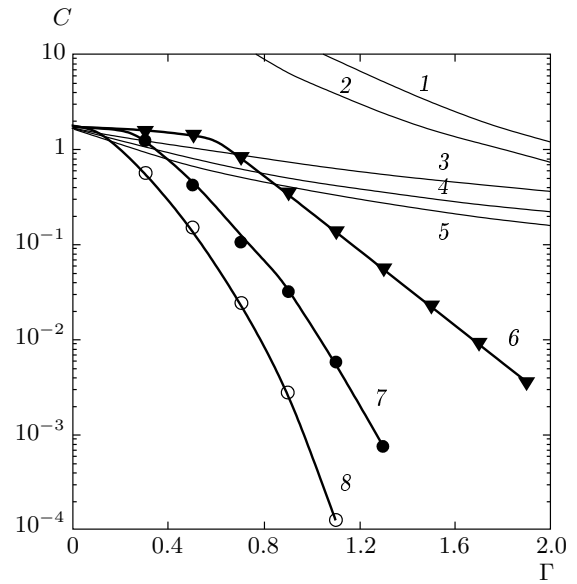


Рис. 3. Результаты расчетов зависимости константы  $C$  от степени неидеальности плазмы при  $Z = 1-3$ : кривые 1 и 2 — с помощью соотношений из [6] соответственно для  $Z = 1$  и  $Z = 3$ ; кривые 3, 4, 5 — с помощью соотношений из [9] для  $Z = 1, 2, 3$ ; кривые 6, 7, 8 — МД-моделирование для  $Z = 1, 2, 3$

### 3. ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ НЕИДЕАЛЬНОСТИ ПЛАЗМЫ НА СКОРОСТЬ РЕКОМБИНАЦИИ

Зависимость частоты рекомбинации от степени электронной неидеальности  $\Gamma$  показана на рис. 2. Видно, что в неидеальной плазме эта зависимость имеет ряд особенностей по сравнению со случаем идеальной плазмы. Наиболее заметной такой особенностью является немонокотный характер зависимости от степени неидеальности плазмы, которая имеет максимум в случае плазмы, содержащей однократно заряженные ионы при степени электронной неидеальности  $\Gamma \approx 0.9$  (рис. 2). В то же время в пределе малых степеней неидеальности результаты расчета хорошо согласуются с частотой трехчастичной рекомбинации для идеальной плазмы [20]:

$$K = CZ^3 e^{10} m^{-1/2} n_e^2 T^{-9/2}, \quad (2)$$

где  $m$  и  $n_e$  — соответственно масса и концентрация электронов,  $Z$  — заряд иона, а  $C = 1-3$  [5]. Значение коэффициента  $C$  при заряде иона  $Z = 1$ , полученное в рамках МД-моделирования, оказывается равным  $C = 1.4$ . Отметим, что корректное описание частоты рекомбинации по абсолютной величине и относительной зависимости в пределе дебаевской плазмы

говорит в пользу достоверности предложенного метода расчета.

В дальнейшем при описании зависимости частоты рекомбинации неидеальной плазмы будет удобно рассматривать коэффициент  $C$  как функцию, содержащую поправки к частоте рекомбинации от степени неидеальности.

При малых степенях неидеальности плазмы коэффициент  $C$  остается практически постоянным, что при  $Z = 1$  соответствует области параметров  $\Gamma < 0.5$ . Однако при больших значениях параметра неидеальности коэффициент  $C$  начинает монотонно уменьшаться (рис. 3), причем при высоких степенях неидеальности плазмы коэффициент убывает быстрее, чем  $\Gamma^{-9/2}$ , по закону, близкому к экспоненциальному. На показатель этой зависимости очень существенное влияние оказывает заряд ионов плазмы (рис. 3). Таким образом, в области высокой неидеальности плазмы

$$C = A(Z)e^{-\lambda(Z)\Gamma}, \quad (3)$$

где  $A(Z)$  и  $\lambda(Z)$  — некоторые функции, зависящие от заряда иона  $Z$ , но не зависящие от  $\Gamma$ . В результате на зависимости частоты рекомбинации от степени неидеальности плазмы возникает максимум и в сильнонеидеальной плазме происходит уменьшение час-

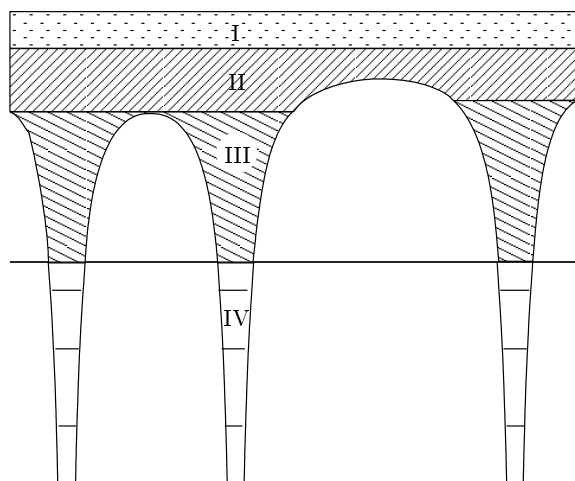


Рис. 4. Схема энергетических состояний электрона в плазме: I — свободные электроны; II — многочастичные состояния; III — парные состояния, IV — дискретный спектр

тоты рекомбинации. Кроме того, на рис. 3 нанесены кривые для коэффициента  $C$ , вычисленного согласно соотношению, взятому из работы [9]; значения микрополей при их построении выбирались в соответствии с распределением Хольтсмарка.

Наличие двух участков на зависимости  $C(\Gamma)$  в неидеальной плазме, на первом из которых коэффициент  $C$  остается практически постоянным, а на втором убывает по экспоненциальному закону, говорит о возможной смене механизма рекомбинации с повышением степени неидеальности плазмы. Возможным объяснением такого явления может являться особенность распределения электронов по энергии в неидеальной плазме. В этом случае на распределении электронов по энергии можно выделить несколько характерных областей (рис. 4). В области I оказываются свободные электроны, в области IV — электроны дискретного спектра. Между ними существуют еще две области: область III парных состояний, которые представляют собой электроны локализованные вблизи одного иона и находящиеся в квазинепрерывном спектре [17], и область II многочастичных состояний.

Области многочастичных флуктуаций [13] и верхняя по энергии часть области парных флуктуаций [17] оказываются слабо заселены. Таким образом, между свободными электронами и дискретным спектром возникает слабозаселенная щель в энергетическом спектре, ширина которой оказывается порядка  $2\Gamma T$  для однозарядной плазмы [17] и будет увеличиваться с ростом степени

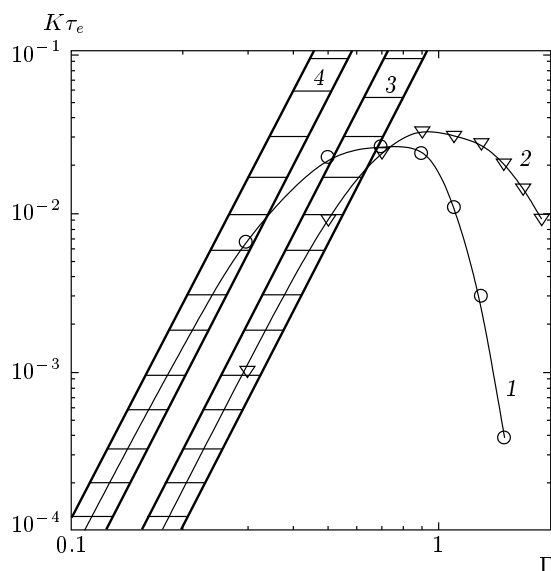


Рис. 5. Зависимость частоты рекомбинации от степени неидеальности плазмы при  $Z = 1$  и  $Z = 2$ : кривые 1 и 2 — результаты МД-моделирования соответственно для  $Z = 2$  и  $Z = 1$ ; области 3 и 4 — случай трехчастичной рекомбинации для  $Z = 1$  и  $Z = 2$  [5]

неидеальности плазмы. При  $\Gamma > 0.5$  ширина щели начинает превосходить характерную тепловую энергию электронов и она начинает существенно влиять на скорость процесса рекомбинации. Как уже указывалось выше, именно в этой области ( $\Gamma > 0.5$ ) для однозарядной плазмы результаты МД-моделирования дают аномальное подавление рекомбинации. Такое совпадение результатов моделирования и предсказания предложенного выше предположения о механизме процесса говорит в пользу достоверности последнего.

Поскольку скорость рекомбинации лимитируется вероятностью преодоления электроном щели в энергетическом спектре, скорость рекомбинации не должна зависеть от выбранной глубины потенциала взаимодействия электронов и ионов, что и подтверждается результатами моделирования (см. рис. 1).

Рассмотрение процесса рекомбинации в неидеальной плазме без учета формирования щели в энергетическом спектре, которая должна сильно подавлять рекомбинацию в результате дрейфа Фоккера–Планка, приводит в работе [6] к результатам, очень плохо согласующимся с теми, которые получены при МД-моделировании (см. рис. 2, 3), что подтверждает важность учета данного эффекта.

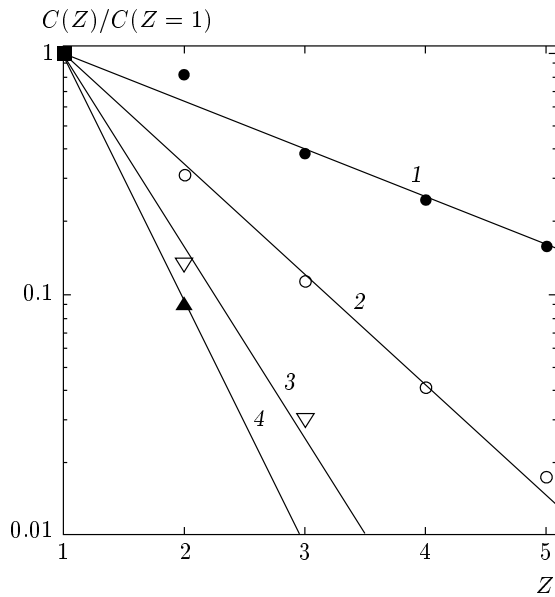


Рис. 6. Соотношение между константами  $C$  при различных значениях заряда иона для  $\Gamma = 0.3$  (1), 0.5 (2), 0.7 (3), 0.9 (4)

#### 4. ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА ИОНОВ НА СКОРОСТЬ РЕКОМБИНАЦИИ

Моделирование проводилось также для плазмы с зарядами ионов  $Z > 1$ . Так, на рис. 5 показана зависимость частоты рекомбинации от степени неидеальности. Видно, что в случае двухзарядной плазмы, так же как и в случае однозарядной, зависимость имеет куполообразный характер, однако положение максимума существенно смещено в область меньших степеней неидеальности плазмы. В результате, хотя при малых неидеальностях ( $\Gamma < 0.7$ ) скорость рекомбинации в двухзарядной плазме выше, чем в однозарядной, в сильнонеидеальной плазме ситуация оказывается обратной, т.е. скорость рекомбинации для плазмы с двухзарядными ионами оказывается меньше, чем для плазмы с однозарядными. Для плазмы с большими зарядами ионов наблюдается схожая закономерность. Также стоит указать, что отношение скоростей рекомбинации в однозарядной и двухзарядной плазме монотонно увеличивается с ростом степени неидеальности. При малых неидеальностях скорость рекомбинации, как и для однозарядной плазмы, хорошо описывается формулой для скорости трехчастичной рекомбинации.

Более подробно зависимость коэффициента рекомбинации  $C$  от заряда ионов показана на рис. 6. Видно, что при малых степенях неидеальности плазмы он стремится к постоянному значению, тогда как

при достаточно больших значениях  $\Gamma$  (при  $\Gamma > 0.6$  для однозарядной плазмы и при меньших  $\Gamma$  для многозарядной) с ростом степени неидеальности плазмы зависимость коэффициента рекомбинации от заряда иона имеет характер, близкий к экспоненциальному с коэффициентом в показателе экспоненты, существенно зависящим от степени неидеальности плазмы. Таким образом, для многозарядной плазмы в области достаточно высокой степени неидеальности имеет место соотношение

$$C(Z) = B(\Gamma)e^{-\mu(\Gamma)Z}, \quad (4)$$

где  $B(\Gamma)$  и  $\mu(\Gamma)$  — некоторые функции, зависящие от степени неидеальности  $\Gamma$ , но не зависящие от заряда иона.

На основании выражений (3) и (4) получим аппроксимацию для частоты рекомбинации в сильнонеидеальной плазме. Для этого представим функцию  $C(Z)$  в виде

$$A(Z)e^{-\lambda(Z)\Gamma} = e^{-\lambda(Z)\Gamma+a(Z)}. \quad (5)$$

В силу соотношения (4) показатель экспоненты  $-\lambda(Z)\Gamma + a(Z)$  должен иметь вид линейной функции от  $Z$ . Таким образом, получаем

$$C = e^{-\lambda(Z)\Gamma+a(Z)} = e^{-\lambda_0\Gamma - \lambda_1 Z\Gamma + a_0 + a_1 Z}, \quad (6)$$

где  $a_0, a_1, \lambda_0, \lambda_1$  — некоторые константы. В результате выражение для коэффициента  $C$  принимает вид

$$C = C_0 e^{a_1 Z} e^{-\lambda_0 \Gamma} e^{-\lambda_1 Z \Gamma}. \quad (7)$$

Частоту рекомбинации в сильнонеидеальной плазме можно описать соотношением

$$K = K_0 Z^3 \Gamma^{9/2} \tau_e^{-1} e^{a_1 Z} e^{-\lambda_0 \Gamma} e^{-\lambda_1 Z \Gamma}, \quad (8)$$

где  $K_0$  — некоторая постоянная. МД-расчет дает  $K_0 = 2.7, a_1 = 0, \lambda_0 = 1.5, \lambda_1 = 3$ .

Первые четыре сомножителя в соотношении (8) совпадают по форме с соответствующими частями выражения для скорости рекомбинации в идеальной плазме. Можно предположить, что последние сомножители, экспоненциально убывающие с ростом степени неидеальности и зарядом ионов, характеризуют вероятность преодоления электроном щели в энергетическом спектре. Структура выражения (8) говорит о наличии двух различных эффектов, приводящих к подавлению процесса рекомбинации в неидеальной плазме.

Первый эффект обусловлен перекрыванием кулоновских потенциальных ям, образуемых соседними ионами. Он входит в соотношение через коэффициент электрон-ионной неидеальности в виде

$\Gamma_{ei} = Z\Gamma$ , оказывая влияние на процесс рекомбинации в силу того, что приводит к исчезновению части высоколежащих уровней и образованию в этой области слабозаселенных локализованных состояний, что затрудняет рекомбинацию.

Второй эффект обусловлен только взаимодействием внутри электронной подсистемы и входит в соотношение через коэффициент степени электронной неидеальности  $\Gamma$ . Влияние взаимодействия в электронной подсистеме в этом случае, вероятнее всего, обусловлено возникающими в ней быстропеременными микрополями, ведущими к потере стабильности части высоколежащих уровней и возникновению в этой области локализованных состояний, что также способствует увеличению ширины щели в энергетическом спектре электронов и ведет к снижению частоты рекомбинации в плазме.

Таким образом, с увеличением заряда ионов плазмы влияние роста степени электронной неидеальности на процесс рекомбинации усиливается. В результате уже при сравнительно низких степенях неидеальности плазмы ( $\Gamma \approx 0.3$ ) при высоких значениях заряда ионов наблюдается существенное отклонение частоты рекомбинации от соответствующей частоты в случае идеальной плазмы. При дальнейшем росте степени неидеальности это отклонение увеличивается и ведет к сильному уменьшению частоты рекомбинации, причем в сильнонеидеальной плазме частота рекомбинации будет убывать с ростом заряда иона.

Данный эффект подавления рекомбинации в неидеальной плазме с высокими значениями зарядов ионов должен оказывать существенное влияние на свойства кластерной плазмы. Рассмотрим в качестве примера типичные параметры такой плазмы [3, 4], выбрав плотность  $n_e = 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ , температуру  $T = 100 \text{ эВ}$  и заряд ионов  $Z = 10$ . Степень электронной неидеальности такой плазмы равна  $\Gamma = 0.136$ . Хотя она не слишком велика, но из-за значительного заряда ионов она будет существенно влиять на скорость рекомбинации. Действительно оценка времени рекомбинации по формуле для идеальной плазмы оказывается порядка 100 фс, что меньше характерного времени разлета кластера, равного 1 пс. Если же учесть влияние степени неидеальности на скорость рекомбинации, то время рекомбинации составит около  $2.1 \cdot 10^5$  плазменных колебаний или 53 пс, что значительно превосходит характерное время разлета кластера и позволяет пренебречь влиянием столкновительной рекомбинации на свойства кластерной плазмы.

Это подтверждает вывод, сделанный в работе [3],

о том, что убыль электронов в результате рекомбинации не играет в кластерной плазме существенной роли, что обусловлено относительной малостью скорости рекомбинации, которая вычислялась там согласно соотношению для трехчастичной рекомбинации, по сравнению со скоростью внешней ионизации кластера. Приведенные выше оценки позволяют утверждать, что скорость рекомбинации в кластерной плазме должна быть мала не только по отношению к скорости внешней ионизации кластера, но также и по абсолютной величине.

## 5. СРАВНЕНИЕ СКОРОСТЕЙ РЕКОМБИНАЦИИ ЧЕРЕЗ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫЕ УРОВНИ И ИНЫЕ ВОЗМОЖНЫЕ КАНАЛЫ

Поскольку в области высоких степеней неидеальности и зарядов ионов скорость столкновительной рекомбинации через высоковозбужденные состояния начинает аномально быстро убывать, вполне возможна ситуация, когда скорость прямой трехчастичной рекомбинации в основное состояние или скорость фоторекомбинации в сильнонеидеальной плазме будут превосходить скорость столкновительной рекомбинации через высоковозбужденные состояния. Сделаем оценку параметров плазмы для случая, когда скорость фоторекомбинации и скорость прямой столкновительной рекомбинации в основное состояние могут превзойти скорость столкновительной рекомбинации через высоковозбужденные состояния. Будем рассматривать только фоторекомбинацию свободного электрона в основное состояние. При этом считаем температуру  $k_B T \ll I$ , где  $I$  — потенциал ионизации атома. Тогда сечение фотоионизации [21]:

$$\sigma_I = 0.23 \frac{a_0^2}{Z^2}, \quad (9)$$

где  $a_0$  — боровский радиус. Для сечения фоторекомбинации из принципа детального равновесия получаем

$$\sigma_R = 0.23 \frac{a_0^2}{Z^2} \frac{g_H}{g_{H^+}} \frac{I^2}{2m\epsilon c^2} = 0.23 \frac{3a_0^2 I^2}{4m\epsilon c^2 Z^2}, \quad (10)$$

где  $\epsilon$  — энергия электрона, а  $g_H$  и  $g_{H^+}$  —  $g$ -факторы для атома и иона водорода. Усредняя по максвел-

ловскому распределению, получаем частоту рекомбинации:

$$K [\text{фс}^{-1}] = 0.275 \frac{a_0^2 I^2}{Z^2 m c^2} \frac{n_e}{\sqrt{m k_B T}} =$$

$$= 1.17 \cdot 10^{-8} \frac{n_e Z^2 [10^{20} \text{ см}^{-3}]}{T^{1/2} [\text{эВ}]}, \quad (11)$$

$$K [\tau_e^{-1}] = 1.166 \cdot 10^{-7} Z^2 \Gamma^{3/2} T [\text{эВ}].$$

Частота прямой рекомбинации в основное состояние можно оценить как [22]

$$K [\text{фс}^{-1}] = 16.5 \cdot 10^{10} C \left( \frac{I}{kT} + 2 \right) \times$$

$$\times (n_e [10^{20} \text{ см}^{-3}])^2, \quad (12)$$

где  $C$  — постоянная, зависящая от типа атома,  $C \sim 10^{-17}$ , или

$$K [\tau_e^{-1}] \approx 1.838 \cdot 10^{-5} \left( \frac{Z^2 \text{Ry}}{kT} + 2 \right) (n_e [10^{20} \text{ см}^{-3}])^{3/2}.$$

Таким образом, условие преобладания столкновительной прямой рекомбинации в основное состояние над фоторекомбинацией можно записать в виде

$$T [\text{эВ}] > \frac{0.053}{\Gamma^{6/5}}, \quad (13)$$

т. е. практически во всей области параметров, где плазма существенно неидеальна, кроме области ультрохолодной плазмы, прямая столкновительная рекомбинация в основное состояние преобладает над фоторекомбинацией.

Кроме того, нужно учитывать, что соотношение (8) обосновано только для области применимости классической молекулярной динамики к описанию процесса рекомбинации в плазме. На эту область помимо требований к параметрам плазмы, описанных в работе [18], должно накладываться еще одно дополнительное, обусловленное тем, что скорость рекомбинации должна определяться преимущественно высоколежащими уровнями, образующими в силу уширения квазинепрерывный спектр. Критерием выполнения данного условия можно считать условие, требующее, чтобы ширина области квазинепрерывного спектра связанных состояний была бы больше температуры плазмы.

Среднюю величину электрического микрополя в плазме можно определить, воспользовавшись распределением Хольцмарка [23]:

$$F = eZ \left( \frac{4\pi}{3} n_i \right)^{2/3}. \quad (14)$$

Для того чтобы оценить параметры плазмы, при которых происходит перекрытие соседних уширенных уровней  $s$  и  $s + 1$  с учетом штарковского уширения и штарковского сдвига, оценим верхнюю и нижнюю границы энергии уширенного уровня [24]:

$$E_n^{up} = -\frac{\text{Ry}}{s^2} + \frac{3}{2} \frac{h^2}{4\pi^2 m Z e} F s (s - 1),$$

$$E_{n+1}^{down} = -\frac{\text{Ry}}{(s + 1)^2} - \frac{3}{2} \frac{h^2}{4\pi^2 m Z e} F s (s + 1). \quad (15)$$

Здесь  $s$  — главное квантовое число для уровней, принадлежащих квазинепрерывному спектру, а  $h$  — постоянная Планка. Тогда условие, при котором верхняя граница  $s$ -го уровня перекрывается с нижней  $(s + 1)$ -го уровня имеет вид

$$F > \frac{4\pi^2 m Z e}{h^2} \frac{Z^2 \text{Ry}}{3s^2} \frac{2s + 1}{s^2 (s + 1)^2}. \quad (16)$$

Полагая  $s \gg 1$ , получаем оценку

$$s > \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{2/15} \left( \frac{8\pi^2 \text{Ry} Z^2 m}{3h^2} \right)^{1/5} n_i^{-2/15} =$$

$$= 2.921 Z^{2/5} n_i^{-2/15} [10^{20} \text{ см}^{-3}], \quad (17)$$

а энергия уровней, образующих квазинепрерывный спектр,

$$E [\text{эВ}] > -1.595 Z^{6/5} n_i^{4/15} [10^{20} \text{ см}^{-3}]. \quad (18)$$

Поскольку при межэлектронных столкновениях изменение энергии электрона с наибольшей вероятностью окажется меньше или порядка  $kT$ , мы получаем оценку для области температур, где наш метод оказывается применим:

$$T [\text{эВ}] < 1.595 Z^{6/5} n_i^{4/15} [10^{20} \text{ см}^{-3}]. \quad (19)$$

Укажем, что такая область параметров достигнута в эксперименте, в частности в ней находится фоторезонансная плазма [25].

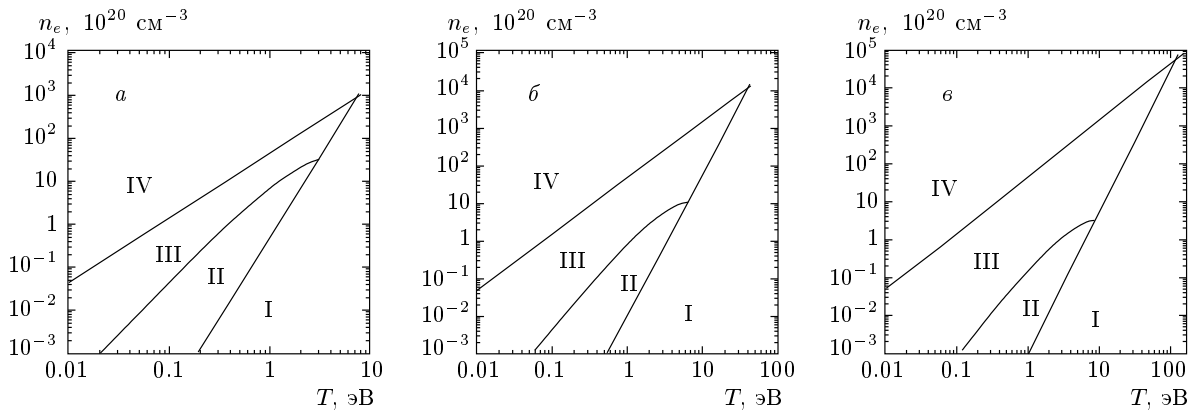
Из условий невырожденности плазмы [1] и (19) можно определить максимальные значения температуры плазмы, выше которой наш метод не применим ни при одном значении плотности:

$$T_{max} [\text{эВ}] = 9.39 Z^{14/9}. \quad (20)$$

Очевидно, что в большинстве случаев, когда рекомбинация существенна, температура оказывается ниже этой величины.

Теперь, используя выражения (8), (13) и (19), можно построить диаграмму характерных областей





**Рис. 7.** Характерные области рекомбинации в плазме при  $Z = 1$  (а),  $3$  (б),  $6$  (в): I — область «горячей» плазмы, где рассматриваемый метод не обоснован; II — область, где преобладает столкновительная рекомбинация через высоковозбужденные уровни; III — область, где преобладает прямая рекомбинация в основное состояние; IV — область вырожденной плазмы

рекомбинации в плазме (рис. 7). При низкой температуре и высокой плотности существует область параметров, где преобладает прямая рекомбинация в основное состояние, причем с ростом заряда ионов эта область расширяется.

Помимо перечисленных выше процессов в плазме может также протекать диэлектронная рекомбинация. Ее скорость может быть описана соотношением

$$K_d = \frac{g_a}{2g_0} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mT} \right)^{3/2} \frac{\omega_a\omega_r}{\omega_a + \omega_r} \times \exp\left(-\frac{\Delta E}{T} + \frac{Z^2}{2s^2T}\right) n_e, \quad (21)$$

где  $g_a$  и  $g_0$  — статистические веса автоионизационного и основного состояний атома,  $\omega_a$  и  $\omega_r$  — вероятности автоионизации и радиационного распада промежуточного автоионизационного состояния,  $\Delta E$  — энергия, излучаемая при таком радиационном переходе,  $s$  — главное квантовое число захваченного электрона в промежуточном состоянии [4]. Отметим также, что обычно  $\omega_a \gg \omega_r$ . Характерная величина  $\omega_r \sim 10^8 \text{ с}^{-1}$  [21]. Тогда для скорости диэлектронной рекомбинации имеем оценку

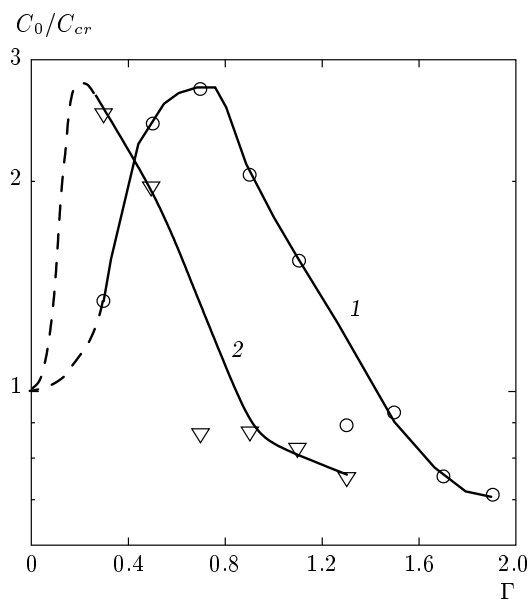
$$K_d = 3 \cdot 10^{-8} \Gamma^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E}{T} + \frac{Z^2}{2n^2T}\right). \quad (22)$$

Нужно отметить, что обычно  $\Delta E > Z^2/2n^2T$ , а различие между этими величинами может составлять несколько электронвольт и более. Следовательно, в области низких температур ( $T < 1$  эВ) диэлектронная рекомбинация будет экспоненциально сильно по-

давляться, уступая по скорости прямой столкновительной рекомбинации в основное состояние. При высоких температурах ( $T > 1$  эВ) в сильнонеидеальной плазме ( $\Gamma > 1$ ) из-за воздействия микрополей должны исчезать практически все возбужденные состояния [17, 18], делая диэлектронную рекомбинацию невозможной. В области умеренных значений степени неидеальности ( $\Gamma = 0.1-1$ ) при не слишком высоких значениях заряда ионов ( $Z < 5$ ) частота столкновительной рекомбинации (8) будет протекать значительно быстрее диэлектронной. Если же заряды окажутся существенно больше, то основную роль будет играть в этой области прямая столкновительная рекомбинация в основное состояние. Таким образом, диэлектронная рекомбинация в неидеальной плазме в большинстве случаев не существенна.

## 6. ВЛИЯНИЕ РАСПОЛОЖЕНИЯ ИОНОВ НА СКОРОСТЬ РЕКОМБИНАЦИИ

Скорость рекомбинации зависит от характера расположения ионов в плазме. Результаты моделирования приведены на рис. 8 и показывают, что в случае газообразной плазмы рекомбинация при не слишком высокой степени неидеальности проходит существенно быстрее, чем в случае плазмы, когда ионы фиксированы в узлах кубической кристаллической решетки. Данный эффект особенно ярко выражен при умеренной степени неидеальности плазмы ( $\Gamma < 1.4$ ), при которой частоты рекомбинации в этих двух случаях могут различаться более чем в два раза. Максимальное различие в частотах рекомбинации (почти в два раза) для однозарядной плаз-



**Рис. 8.** Отношение констант  $C_0$  для газообразной плазмы и  $C_{cr}$  для плазмы с ионами, локализованными в узлах кристаллической решетки: 1 —  $Z = 1$ ; 2 —  $Z = 2$

мы наблюдается при степени неидеальности  $\Gamma = 0.9$ . При более высоких степенях неидеальности имеет место обращение эффекта, т. е. скорость рекомбинации в плазме с ионами, фиксированными в узлах кристаллической решетки, начинает превышать скорость рекомбинации в плазме с их равновесным распределением.

В случае плазмы с ионами больших зарядов эффект сохраняется, но происходит его смещение в область с меньшей степенью электронной неидеальности. Сам эффект зависимости частоты рекомбинации от поведения ионов обусловлен, вероятно, тем, что возникновение части пар зависит от флуктуаций ионной плотности, которые в случае ионов, фиксированных в узлах кристаллической решетки, оказываются невозможны.

### 7. ВЫВОДЫ

Результаты проведенного молекулярно-динамического моделирования показывают, что

- 1) они согласуются с результатами теории трехчастичной рекомбинации в области малых степеней неидеальности плазмы для разных  $Z$ ;
- 2) существует граничное значение параметра неидеальности, разделяющее области, где скорость

рекомбинации совпадает со скоростью трехчастичной рекомбинации и где они существенно различаются; для однозарядной плазмы эта граница находится при  $\Gamma = 0.5$ ;

3) скорость рекомбинации при высокой степени неидеальности плазмы начинает убывать с ростом неидеальности (для однозарядной плазмы это происходит при  $\Gamma > 0.9$ , для двухзарядной — при  $\Gamma > 0.7$ , при дальнейшем росте заряда иона максимум частоты рекомбинации будет продолжать смещаться в область меньшей неидеальности);

4) столкновительная рекомбинация в неидеальной многозарядной плазме подавляется с ростом заряда ионов и степени неидеальности плазмы;

5) механизм уменьшения частоты рекомбинации в сильнонеидеальной плазме связан, вероятно, с возникновением щели в энергетическом спектре, обусловленной быстрым уменьшением времени жизни и концентрации слабосвязанных парных флуктуаций в неидеальной плазме с ростом степени неидеальности;

6) кристаллическое расположение ионов приводит к снижению скорости столкновительной рекомбинации при умеренной степени неидеальности плазмы,  $\Gamma < 1.4$  ( $Z = 1$ ),  $\Gamma < 0.7$  ( $Z = 2$ ) и к ее росту при высокой.

Выражаю признательность И. В. Морозову, Г. Э. Норману и И. Ю. Скобелеву за многочисленные полезные обсуждения и помощь, Б. М. Смирнову за обсуждение сопоставления трехчастичной и столкновительной рекомбинации, а также М. Ю. Романовскому и В. П. Крайнову за ценные замечания по содержанию статьи. Расчеты выполнены на вычислительном кластере ФМБФ МФТИ. Благодарю 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)) и Sandia National Laboratories по программе «U. S. DOE/NNSA Advanced Simulation and Computing».

### ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Физика неидеальной плазмы*, Физматлит, Москва (2004).
2. Г. А. Месяц, *Эттоны в вакуумном разряде: пробой, искра, дуга*, Наука, Москва (2000).

3. V. P. Krainov and A. V. Sofronov, *Contribution to Plasma Phys.* **47**, 234 (2007).
4. В. П. Крайнов, А. В. Софронов, *ЖЭТФ* **130**, 43 (2006).
5. А. В. Елецкий, Б. М. Смирнов, в кн. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, Вводный том I под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000), с. 190.
6. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *ДАН* **296**, 576 (1987).
7. Ю. К. Куриленков, *ТВТ* **18**, 1312 (1980).
8. Y. Nakn, *Phys. Lett.* **231A**, 82 (1993).
9. М. Ю. Романовский, *ЖЭТФ* **144**, 1230 (1998).
10. С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, *УФН* **164**, 297 (1994).
11. S. G. Kuzmin and T. M. O'Neil, *Phys. Plasmas* **9**, 3743 (2002).
12. В. С. Волокитин, И. О. Голосной, Н. Н. Калиткин, *Матем. моделирование* **5**(8), 83 (1993).
13. А. С. Каклюгин, Г. Э. Норман, *ТВТ* **22**, 1041 (1984).
14. А. М. Игнатов, А. И. Коротченко, В. П. Макаров и др., *УФН* **165**, 113 (1995).
15. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3759 (2001).
16. В. Эбелинг, В. Крефт, Д. Кремп, *Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле*, Мир, Москва (1979).
17. А. В. Ланкин, Г. Э. Норман, *ДАН* **418**, 466 (2008).
18. А. В. Ланкин, Г. Э. Норман, *ТВТ* **46** (2008).
19. И. В. Морозов, Г. Э. Норман, *ЖЭТФ* **127**, 412 (2005).
20. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, *ЖЭТФ* **46**, 1281 (1964).
21. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
22. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
23. В. С. Лисица, *УФН* **122**, 449 (1977).
24. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2004).
25. И. М. Бегеров, А. В. Елецкий, Б. М. Смирнов, *УФН* **155**, 265 (1988).