

ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ДИФFUЗИЯ В ПРОСТРАНСТВЕ ЭНЕРГИИ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНА В НЕИДЕАЛЬНОЙ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЕ

С. Я. Бронин^а, Б. В. Зеленер^а, Б. В. Зеленер^{а*}, Э. А. Маньжин^б, Д. Р. Хихлуха^{с**}

^аОбъединенный институт высоких температур Российской академии наук
127412, Москва, Россия

^бРоссийский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

^сНациональный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 октября 2010 г.

Получены функции распределения и коэффициент диффузии в пространстве энергии ридберговских состояний электрона в ультрахолодной плазме в зависимости от температуры. Для этого численно решается система кинетических уравнений баланса. В качестве начальных условий используются результаты, полученные в предыдущих работах методом молекулярной динамики. На основе расчетов потоков ридберговских электронов рассчитана зависимость коэффициента рекомбинации от температуры. Получено хорошее согласие с коэффициентом рекомбинации, рассчитанным ранее методом молекулярной динамики.

1. ВВЕДЕНИЕ

В полностью ионизованной неравновесной кулоновской плазме при очень низких температурах [1–3] основным процессом, определяющим рекомбинацию и распределение электронов по энергиям, является взаимодействие типа электрон–электрон–ион. В предыдущих работах [4–6] мы исследовали неравновесную ультрахолодную плазму методом молекулярной динамики. Рассчитывалась модель двухкомпонентной двухтемпературной водородной плазмы, состоящей из протонов и электронов. В этой модели взаимодействие одноименных зарядов осуществляется по закону Кулона. Разноименные заряды также взаимодействуют по закону Кулона, но скорректированному на малых расстояниях таким образом, что при $r < A$ потенциал взаимодействия принимался постоянным: $\Phi_{ei} = -e^2/A$, где величина A изменялась от a_0 до $10a_0$ (a_0 — боровский радиус, e — заряд электрона).

Расчеты проводились методом молекулярной ди-

намики в области начальных температур электронов $T_e^0 = 1\text{--}50$ К и плотностей $n_e^0 = 10^8\text{--}10^{12}$ см⁻³. Методом Рунге–Кутты четвертого порядка численно решалась система уравнений Ньютона в ячейке с длиной ребра $L = (N/n_e)^{1/3}$. Число частиц N варьировалось в пределах сотни. Выбор N и зависимость от числа частиц подробно изучались в работах [4, 5]. Там же рассматривалась зависимость результатов расчета от выбора A для потенциала взаимодействия между разноименными зарядами.

При расчете этим методом функции распределения электронов $f(E/T_e)$ и коэффициента диффузии $D(E/T_e)$ не удается получить достаточную точность в области $E/T_e \leq -4$ из-за небольшого числа частиц в ячейке с периодическими граничными условиями и, следовательно, малого числа событий, когда электрон находится на расстояниях, значительно меньших среднего. При увеличении числа частиц время счета растет пропорционально квадрату числа частиц.

На рис. 1 в качестве примера приведены результаты расчета $f(E/T_e)$ методом молекулярной динамики при $n_e^0 = 10^{10}$ см⁻³ и $T_e = 7.19$ К ($\gamma_e = 0.5$)

*E-mail: Zelener@ihed.ras.ru

**E-mail: DKhikhlukha@ihed.ras.ru

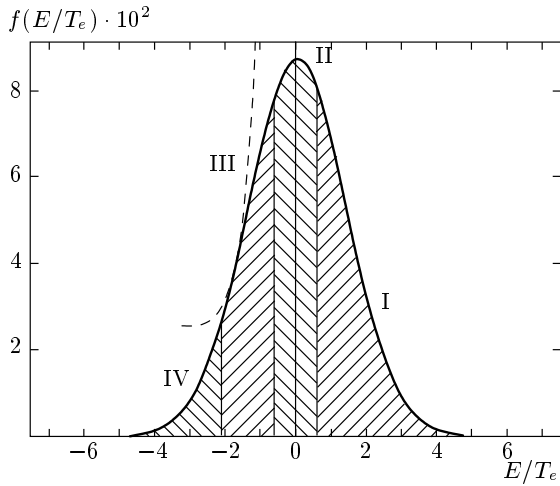


Рис. 1. Зоны функции распределения ($\gamma_e = 0.5$, $T_e = 7.19$ К, $n_e^0 = 1 \cdot 10^{10}$ см⁻³): I — свободные электроны; II — квазисвязанные электроны (столкновительные комплексы); III — связанные электроны в ридберговских состояниях; IV — рекомбинационный хвост. Штриховая линия — равновесная функция распределения

[5, 6]. График условно разделен на четыре энергетических зоны. Зона I соответствует свободным электронам и ограничена интервалом $\gamma_e \leq E/T_e \leq \infty$, где параметр неидеальности $\gamma_e = e^2 n_e^{1/3} / T_e$. В зоне II в интервале энергий $-\gamma_e \leq E/T_e \leq \gamma_e$ находятся электроны как бы уже не свободные, но еще не связанные. В зоне III при $-\epsilon_{bn} \leq E/T_e \leq \gamma_e$ находится большая часть электронов в связанных ридберговских состояниях. Значение $\epsilon_{bn} = E_{bn}/T_e$ (E_{bn} — энергия связи электрона) — это уровень энергии, на котором существует максимальное сопротивление рекомбинационному потоку, так называемое узкое горло [7]. В случае $\gamma_e \rightarrow 0$ имеем $\epsilon_{bn} = 3/2$ [7]. Эта область характеризуется тем, что функция распределения здесь близка к равновесной функции распределения для водорода (штриховая кривая) при данной температуре. Этот факт позволяет определить по формуле Саха эффективную концентрацию свободных электронов, обеспечивающих это равновесие,

$$n_e^* = \sqrt{\frac{n_k(E_k/T_e)}{\lambda_e^3 k^2} \exp\left(\frac{E_k}{T_e}\right)}, \quad (1)$$

где k — главное квантовое число уровня E_k с заселенностью n_k , $\lambda_e = \hbar/\sqrt{2\pi m T_e}$ — тепловая длина волны де Бройля, m — масса электрона.

Соотношение (1) позволяет перейти к расчету заселенностей дискретных уровней, начиная с некото-

рого уровня с главным квантовым числом k и ниже, методом кинетических уравнений баланса [7].

Наконец, зона IV в интервале $-E_0/T_e \leq E/T_e \leq -\epsilon_{bn}$ — это так называемый рекомбинационный хвост. Под рекомбинационным хвостом понимается та часть неравновесной функции распределения, которая начинается в конце равновесного участка и продолжается до основного состояния. Этот участок кривой $f(E/T_e)$, как показывают расчеты, быстро затухает, а число электронов, соответствующее этой части функции распределения, составляет менее 10% от их полного числа.

2. МЕТОД КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ БАЛАНСА

Система кинетических уравнений баланса в нашем случае состоит из k уравнений для каждого состояния с соответствующим главным квантовым числом, начиная с некоторого заданного k и до основного состояния, уравнения для концентрации свободных электронов n_e и уравнения для температуры электронов T_e :

$$\frac{dn_k}{dt} = \sum_{k \neq m} (n_m \omega_{mk} - n_k \omega_{km} + n_k \omega_{ke} - n_e n^+ \omega_{ek}), \quad (2)$$

$$\frac{dn_e}{dt} = \sum_k (n_k \omega_{ke} - n_e n^+ \omega_{ek}), \quad (3)$$

$$\frac{dT_e}{dt} = Q_{el} + Q_{in}, \quad (4)$$

где n^+ — число ионов, ω_{mk} , ω_{km} и ω_{ke} , ω_{ek} — вероятности ударных переходов с уровня на уровень и вероятности ударных переходов в непрерывный спектр и обратно; Q_{el} и Q_{in} — скорости потерь энергии свободных электронов соответственно на упругие и неупругие соударения.

Для решения системы задаются начальные условия для температуры и концентрации электронов. Заселенности всех уровней, кроме последнего, в начальный момент принимаются равными нулю, а относительно последнего считается, что его заселенность находится в равновесии с континуумом. Для рассматриваемых условий характерна квазиравновесная динамика кинетических процессов. Самым быстрым из всех процессов является максвеллизация электронов, устанавливающаяся за время τ_T , что позволяет пользоваться зависящими от температуры вероятностями переходов. Максимальное характерное время — это время рекомбинации τ_{rec} ,

которое в рассматриваемых условиях много больше τ_k — характерного времени установления заселенностей верхних уровней, которые дают определяющий вклад в кинетику рекомбинации. Нижние уровни заселяются со скоростью рекомбинации, и квазистационарный характер процесса выражается в том, что в каждый данный момент времени функция $f(E_k/T_e)$ представляется стандартной функцией, зависящей от значений на левой и правой границах спектра, т. е. функция распределения подстраивается под медленно меняющиеся значения температуры и концентрации электронов и связанные с ними заселенности нижних уровней и верхнего уровня, находящегося в равновесии с континуумом. Время τ_T определяется частотой двухчастичных столкновений:

$$\tau_T^{-1} = \frac{\pi e^4 n_e L}{\sqrt{2m} T_e^{3/2}}, \quad (5)$$

где L — кулоновский логарифм. Для оценки τ_k можно воспользоваться выражением [7]

$$\tau_k^{-1} = \frac{\sqrt{2\pi L} n_e e^4}{Ry \sqrt{m T_e}} \left(\frac{Ry}{E_k} \right)^2, \quad k > 2. \quad (6)$$

Полагая $n_e = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 2 \text{ К}$, $L = 1$ и $k = 10$, получим $\tau_T = 10^{-10} \text{ с}$, $\tau_k = 10^{-8} \text{ с}$. Время рекомбинации по данным работ [5, 6] равно $\tau_{rec} = 10^{-7} \text{ с}$.

Для решения системы кинетических уравнений баланса также необходимо знание вероятностей переходов. Для их определения обычно используются различные приближенные выражения. Так, в пионерских работах Бейтса и Кингстона [8] использовались выражения, полученные Гризинским [9]. В работах Дравина [10] использовались им же полученные полуэмпирические формулы, а в работе Джонсона и Хинова [11] — другие полуэмпирические выражения. Выбор этих вероятностей определяется диапазоном температур. Для ультрахолодной плазмы уже традиционно [12, 13] используются вероятности перехода, рассчитанные Мансбахом и Кеком [14] методами Монте-Карло и молекулярной динамики для классической задачи трех взаимодействующих по закону Кулона частиц (электрон–электрон–ион) в рамках идеи Вигнера [15]. Еще в 1937 г. Вигнер предложил определять вероятности перехода не через сечение столкновения, а через вероятность пересечения третьей частицей заданного значения поверхности энергии взаимодействия двух других частиц. В недавней работе [16] были проделаны расчеты, повторяющие методику работы [14] в большем диапазоне энергий налетающего электрона, которые

подтвердили выражения для вероятностей перехода, предложенные в [14]. Эти вероятности перехода в случае возбуждения и тушения имеют вид

$$\begin{aligned} \omega^{ex}(\epsilon_k, \epsilon_m) &= 2.85 \cdot 10^{-6} \frac{n_e}{T_e^{1/6}} \frac{k^{4.66}}{m^3} \times \\ &\times \exp(-|\Delta\epsilon_{km}|), \quad (7) \\ \omega^q(\epsilon_k, \epsilon_m) &= 2.85 \cdot 10^{-6} \frac{n_e}{T_e^{1/6}} \frac{k^{6.66}}{m^5}, \end{aligned}$$

где $\Delta\epsilon_{km} = \epsilon_k - \epsilon_m$, а k и m — главные квантовые числа, соответствующие энергиям $\epsilon_k = E_k/T_e$ и $\epsilon_m = E_m/T_e$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $f(E/T_e)$

Как было сказано выше, для расчета функции распределения $f(E/T_e)$ в области отрицательных значений энергии порядка нескольких kT_e и больше с помощью системы уравнений (2)–(4) необходимо знать концентрацию свободных электронов. Для этого воспользуемся выражением (1). На рис. 2 приведены значения величины $\ln(n_e^2 \lambda_e^3 / 2)$ для двух значений $f(E/T_e)$, рассчитанных методом молекулярной динамики в области энергий, где существует квазиравновесие при заданной температуре T_e (см. рис. 1). Расчетные точки можно аппроксимировать константой в некоторой области и определить

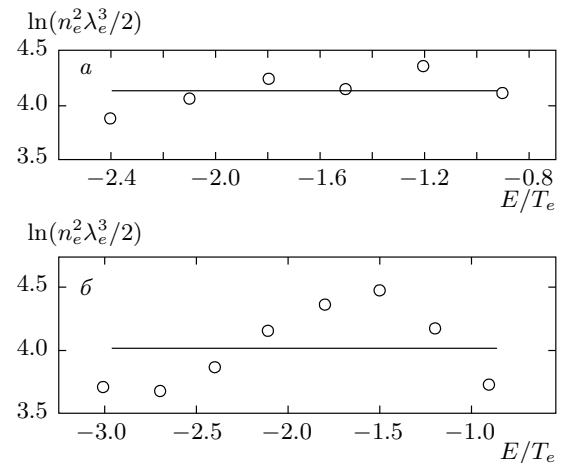


Рис. 2. Значения $\ln(n_e^2 \lambda_e^3 / 2)$ для различных температур: a — $\gamma_e = 0.5$, $n_e^* = 2.41 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 7.19 \text{ К}$; b — $\gamma_e = 0.9$, $n_e^* = 1.47 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 4 \text{ К}$. Точки — расчет методом молекулярной динамики, прямые линии соответствуют ионизационному равновесию

Таблица. Эффективные значения концентрации свободных электронов n_e^* и квазистационарных потоков электронов j_e для разных температур

γ_e	T_e , К	n_e^* , 10^9 см^{-3}	j_e , $10^{15} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$
0.5	7.2	2.41	2.5
0.7	5.1	1.90	2.3
0.9	4.0	1.47	2.2
1.8	2.0	0.62	1.2

эффективную концентрацию свободных электронов (см. таблицу). Зная n_e^* и T_e , можно провести расчет системы уравнений баланса. Причем в качестве максимального значения k необходимо выбрать значение из той области, где функция $f(E/T_e)$ совпадает с равновесной (см. рис. 1). Обычно $k \geq 150$ и, соответственно, решается такое же число уравнений.

На рис. 3 представлены зависимости заселенностей ридберговских состояний от энергии. Как видно из графиков, получено хорошее совпадение результатов обоих численных способов расчета $f(E/T_e)$ в области квазиравновесия и части рекомбинационного хвоста функции распределения. На рис. 4 в обычных координатах проведено сравнение функций $f(E/T_e)$, рассчитанных двумя способами, откуда также следует хорошее согласие результатов. Совпадение результатов расчетов, проведенных двумя способами связано прежде всего с тем, что выбранные вероятности перехода определяются путем решения уравнений движения системы трех частиц. Это полностью соответствует расчетам методом молекулярной динамики в той области связанных состояний электрона, где три частицы взаимодействуют на расстояниях, много меньших среднего, и влиянием окружения можно пренебречь.

В области больших отрицательных значений энергии результаты расчета методом молекулярной динамики отличаются от результатов расчета системы кинетических уравнений баланса по причине указанной ранее: небольшого числа частиц в ячейке и малого количества описанных выше состояний. Надо также отметить, что в ультрахолодной плазме область энергий $E_k = -T_e$ при температурах $T_e = 2-7$ К соответствует $k = 270 \div 150$.

На всех рисунках графики $f(E/T_e)$ для удобства представлены непрерывными кривыми, так как расстояния между уровнями в изображенной обла-

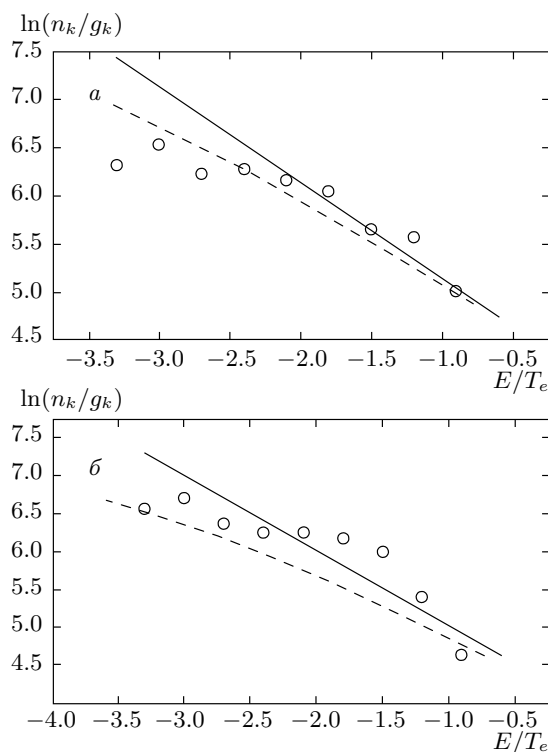


Рис. 3. Зависимости заселенностей ридберговских состояний от энергии для разных температур (g_k — плотность состояний на уровне k): a — $\gamma_e = 0.5$, $n_e^* = 2.41 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 7.19 \text{ К}$; b — $\gamma_e = 0.9$, $n_e^* = 1.47 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 4 \text{ К}$. Точки — расчет методом молекулярной динамики, сплошная линия — ионизационное равновесие по формуле Саха, штриховая — расчет кинетических уравнений баланса для различных пар n_e^* и T_e

сти энергии чрезвычайно малы по сравнению с T_e . Таким образом, нам удалось, используя результаты расчетов методом молекулярной динамики, построить функцию распределения $f(E/T_e)$ в области ридберговских состояний в зависимости от степени неидеальности ультрахолодной плазмы.

Хотелось бы попутно сделать замечание по поводу расчетов функции распределения $f(E/T_e)$ методом молекулярной динамики в области рекомбинационного хвоста. В работах [17, 18] было высказано мнение, что метод молекулярной динамики в микроканоническом ансамбле не позволяет в принципе рассчитать рекомбинационную часть функции распределения. Это утверждение основано на приближенных аналитических оценках рекомбинационного участка функции распределения. Расчеты [17, 18] проводились для низкотемпературной плазмы при $T_e = (0.2-3) \cdot 10^4 \text{ К}$. Так как анализ с использовани-

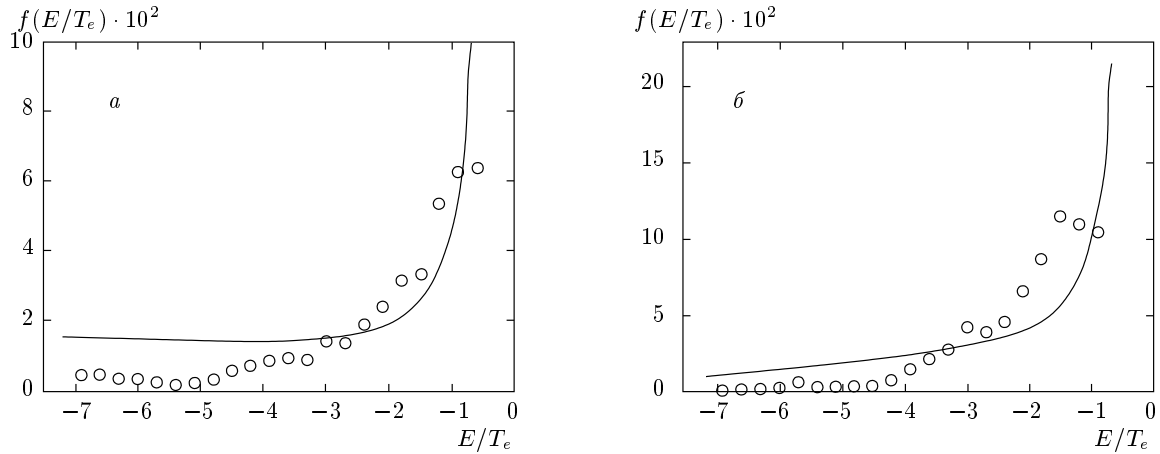


Рис. 4. Сравнение функций распределения, рассчитанных методами молекулярной динамики (точки) и кинетических уравнений баланса (кривые): а — $T_e = 7$ К ($\gamma_e = 0.5$); б — $T_e = 4$ К ($\gamma_e = 0.9$)

ем метода решения кинетических уравнений баланса, как в нашей работе, проделан не был, это мнение, с нашей точки зрения, является неверным.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ $D(E/T_e)$

Для расчета коэффициента диффузии $D(E/T_e)$ в области ридберговских состояний электрона нет необходимости решать систему уравнений. Для этого достаточно знать вероятности ударных переходов, причем коэффициент диффузии имеет смысл рассматривать для энергий перехода, меньших kT_e . Вероятности перехода (7) таковы, что они максимальны при переходе электрона на соседний уровень. При переходе на более далекий по спектру уровень эти вероятности быстро уменьшаются. Следовательно, пока расстояние между соседними уровнями меньше kT_e , можно говорить о диффузии в пространстве энергий. Коэффициент диффузии можно записать, используя вероятности перехода (7), следующим образом:

$$D \left(\frac{E}{T_e} \right) = \frac{T_e^2}{2} \sum_{i \neq k} (\epsilon_k - \epsilon_i)^2 \omega_{ki}(\epsilon_k, \epsilon_i). \quad (8)$$

На рис. 5 приведены результаты расчетов $D(E/T_e)$ по формуле (8) и методом молекулярной динамики для различных T_e . Расчеты по формуле (8) выполнены в области энергий $E/T_e < -4$ и для эффективных концентраций электронов, приведенных в таблице. Область энергий ограничивается условием, при котором часть коэффициента диффузии, связанная с переходами на более высокие

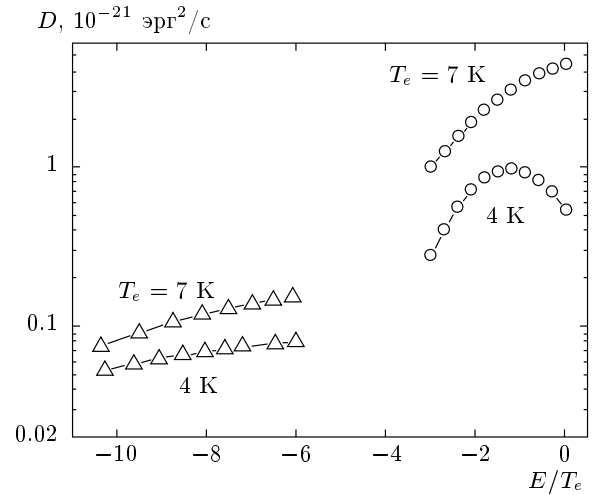


Рис. 5. Результаты расчетов коэффициента диффузии электрона в пространстве ридберговских энергий для различных температур при $n_e^0 = 10^{10}$ см⁻³ методом молекулярной динамики (кружки) и путем суммирования вероятностей (треугольники)

уровни, должна определяться только водородоподобными уровнями.

Результаты обоих расчетов в этой области близки, что позволяет построить интерполяционные кривые $D(E/T_e)$ там, где можно говорить о диффузии в пространстве энергии. На рис. 6 приведены кривые для четырех температур.

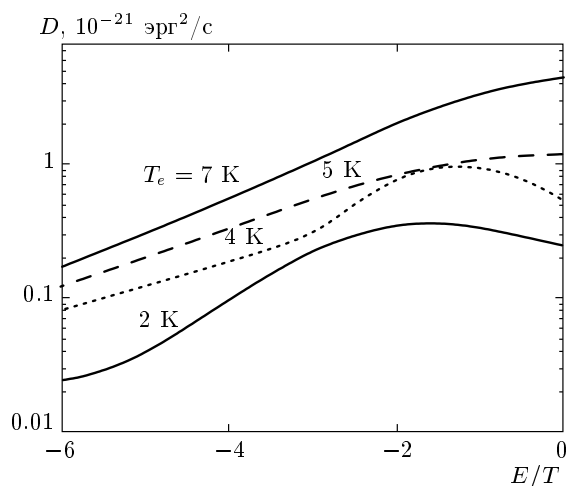


Рис. 6. Коэффициенты диффузии электрона в пространстве ридберговских энергий для различных температур при $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ (результаты интерполяции)

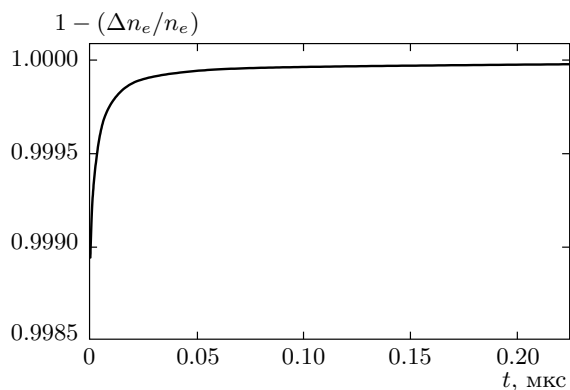


Рис. 7. Изменение концентрации свободных электронов в зависимости от времени ($\gamma_e = 0.5$, $n_e^* = 2.4 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 7.19 \text{ К}$)

5. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА РЕКОМБИНАЦИИ

При решении системы кинетических уравнений баланса были рассчитаны квазистационарные потоки свободных электронов для ряда температур (см. таблицу). Квазистационарность потока электронов подтверждается временной зависимостью изменения концентрации свободных электронов, пример которой приведен на рис. 7. Видно, что за исключением небольшого релаксационного начального промежутка времени отношение текущей концентрации свободных электронов к начальной мало отличается от единицы и почти постоянно. На осно-

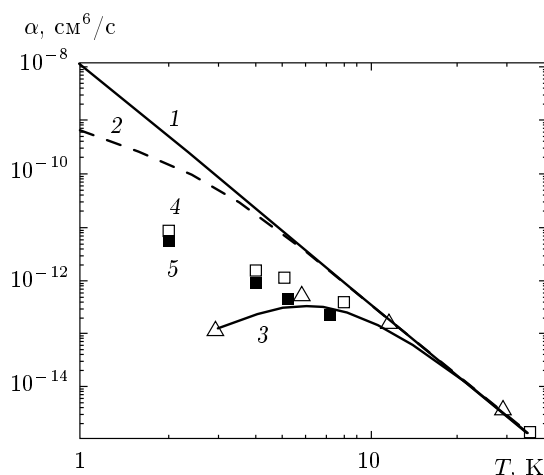


Рис. 8. Результаты расчетов коэффициента рекомбинации: 1 — по формуле Гуревича–Питаевского [19]; 2 — в приближении ближайшего соседа [20]; 3 — Ланкина–Нормана [21]; 4 — методом молекулярной динамики; 5 — методом решения системы кинетических уравнений баланса

вании полученных потоков был рассчитан коэффициент рекомбинации для начальной концентрации $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ при различных температурах по следующей формуле:

$$\alpha = \frac{\Delta n_e / \Delta t}{n_e^{*3}} \tag{9}$$

Эти результаты представлены на рис. 8. Там же приведены данные расчетов коэффициента рекомбинации [6], полученные методом молекулярной динамики, и аналитические зависимости для слабонедельной плазмы, полученные по формуле Гуревича–Питаевского [19], и из работ [20, 21].

Коэффициенты рекомбинации, рассчитанные нами обоими способами, совпадают в пределах расчетной погрешности.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование метода кинетических уравнений баланса совместно с результатами, полученными методом молекулярной динамики, позволило определить функции распределения и коэффициент диффузии электронов в ультрахолодной плазме в широкой области энергий, включающей и область многочастичных состояний, и область дискретных ридберговских состояний. Этот подход позволил проверить и подтвердить правильность расчета коэффициента рекомбинации методом молекулярной

динамики. Также удалось установить взаимную согласованность обоих методов при расчете функции распределения $f(E/T_e)$ в области энергий, где можно пренебречь многочастичными взаимодействиями.

Авторы приносят благодарность всем сотрудникам Теоретического отдела ОИВТ РАН им. Л. М. Бибермана за полезные обсуждения и замечания.

Работа поддержана грантами Президента РФ (№№ МК-7883.2006.2, МК-4872.2008.2), Программой РАН академика В. Е. Фортова, РФФИ (гранты №№ 06-02-16845, 08-02-01328а, 10-02-00399а), Федеральным агентством по науке и инновациям (грант № 02.740.11.0433) и Министерством образования и науки РФ (гранты №№ ФЦП П1235, ФЦП 14.740.11.0604).

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 et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 31 (2000).
3. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3759 (2001).
4. A. A. Bobrov, E. A. Manukin, B. V. Zelener et al., *Laser Phys.* **17**, 15 (2007).
5. A. A. Бобров, С. Я. Бронин, Б. Б. Зеленер и др., *ЖЭТФ* **134**, 179 (2008).
6. A. A. Бобров, С. Я. Бронин, Б. Б. Зеленер и др., *ЖЭТФ* **139**, (2011).
7. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
8. D. R. Bates and A. E. Kingston, *Planet and Space Sci.* **2**, 1 (1965).
9. M. Gryzinsky, *Phys. Rev.* **138**, 336 (1965).
10. H. W. Drawin, *Z. Naturforsch.* **24a**, 1492 (1969).
11. L. C. Johnson and E. Hinov, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **13**, 333 (1973).
12. T. Pohl, T. Pattard, and J. M. Rost, *Phys. Rev. A* **68**, 010703 (2003).
13. T. Pohl, T. Pattard, and J. M. Rost, *Phys. Rev. A* **70**, 033416 (2004).
14. P. Mansbach and J. C. Keck, *Phys. Rev.* **181**, 275 (1969).
15. E. P. Wigner, *J. Chem. Phys.* **5**, 720 (1937).
16. T. Pohl, D. Vrinceanu, and H. R. Sadeghpour, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 223201 (2008).
17. С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. Н. Яковленко, *Изв. вузов, Физика* **11**, 3 (1991).
18. С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. Н. Яковленко, *УФН* **164**, 297 (1994).
19. А. В. Гуревич, Л. П. Пятаевский, *ЖЭТФ* **46**, 1281 (1964).
20. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *ДАН* **296**, 577 (1987).
21. A. V. Lankin and G. E. Norman, *J. Phys. A* **42**, 214032 (2009).