

01;04

Предельно неидеальная метастабильная переохлажденная плазма

© А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Институт общей физики РАН,
117942 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 10 января 1996 г.)

На основе прямого моделирования динамики системы многих кулоновских частиц рассмотрена стадия формирования метастабильного состояния плазмы из начального, сильно неидеального состояния, а также некоторые свойства этого метастабильного переохлажденного состояния. Показано, что релаксация средней кинетической энергии частиц может характеризоваться универсальной безразмерной функцией, в частности, имеет место предельное значение степени неидеальности плазмы, которое может быть достигнуто в метастабильном состоянии, в отсутствие внешнего воздействия. Вычисленные парные корреляционные функции хорошо согласуются с результатами дебаевской модели даже за рамками ее применимости. Исследована зависимость от времени полного дипольного момента системы частиц. Показано, что имеют место колебания полного дипольного момента. Эти коллективные колебания происходят с частотой несколько меньшей ленгмюровской, причем колебания свободных и связанных электронов происходят в противофазе. Выдвинута гипотеза о том, что рекомбинационная релаксация замораживается за счет взаимодействия квазисвязанных электронов с ленгмюровскими колебаниями свободных электронов.

Введение

Результаты моделирования из первопринципов динамики многих кулоновских частиц привели к выводам достаточно радикального характера (см. [1,2] и цитированную там литературу). Было показано, что в классической кулоновской плазме рекомбинационные процессы замораживаются, если на движение заряженных частиц не оказывается внешнее воздействие стохастического характера. Речь идет о воздействии, внешнем по отношению к динамическим уравнениям Ньютона, которые управляют движением частиц. Стохастический характер воздействия проявляется в утрате динамической памяти, т.е. потере обратимости движения частиц. Стохастическое воздействие специально вводилось в коды, моделирующие движение частиц, и стимулировало рекомбинационные процессы; кроме того, стохастическое воздействие на движение частиц оказывают погрешности численного моделирования (см., например, [3–5], а также [1,2]).

С той точностью, которую удается достичь при численном моделировании, можно говорить о том, что классическая кулоновская плазма может находиться в метастабильном состоянии, переохлажденном по степени ионизации. В этом состоянии формируется квазистационарная функция распределения электронов по полной энергии, радикально отличающаяся в области отрицательных энергий как от бальмовского распределения, так и от распределения, имеющего место при рекомбинационной релаксации. В то же время распределение электронов по скоростям сохраняет максвелловский вид, что позволяет пользоваться понятием температуры электронов для этого неравновесного метастабильного состояния.

Температура электронов, имеющая место после релаксации к метастабильному состоянию, оказывается выше того начального значения, в соответствии с которым в

расчетах выбираются начальные значения скоростей частиц (исходные координаты электронов и ионов обычно задаются в соответствии с однородным распределением). При этом если начальное значение температуры достаточно велико, чтобы плазма была идеальна, то нагрев несуществен. Если же начальные скорости выбрать близкими к нулю (нулевая начальная температура), то на стадии формирования метастабильного состояния происходит разогрев, препятствующий созданию метастабильной плазмы со сколь угодно высокой степенью неидеальности.

В данной работе рассмотрены как стадия формирования метастабильного состояния плазмы из начального, сильно неидеального состояния, так и некоторые свойства предельно неидеального состояния метастабильной плазмы, изолированной от внешних стохастических воздействий. Вычислены корреляционные функции между одновременными положениями пар частиц. Исследуются коллективные колебания полного дипольного момента системы частиц. Результаты этой новой серии расчетов подтверждают общие выводы работ [1–8] о существовании метастабильного состояния и о том, что понятия дебаевского радиуса и ленгмюровской частоты не теряют смысла при продвижении в область неидеальности плазмы. Выдвинута также гипотеза о том, что рекомбинационная релаксация замораживается за счет взаимодействия квазисвязанных электронов с ленгмюровскими колебаниями свободных электронов.

О предельной неидеальности метастабильной классической кулоновской плазмы

а) Система уравнений. Рассматривалась временная эволюция системы из n электронов и n ионов, заключенных в куб с абсолютно жесткими

стенками, ограничивающими движение частиц (подробнее см. [1,2]). Длина ребра куба a бралась такой, чтобы обеспечить задаваемую плотность заряженных частиц $N_e = N_i = n/a^3$.

Далее будем измерять величины, имеющие размерность длины в единицах межчастичного расстояния $N_e^{-1/3}$, а величины, имеющие размерность времени, в единицах обратной ленгмюровской частоты

$$\omega_L^{-1} = \sqrt{\frac{m_e}{4\pi e^2 N_e}},$$

где m_e — масса электрона, e — его заряд.

При этом безразмерная система уравнений Ньютона для электронов и ионов имеет вид

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_k}{d\tau^2} = \frac{1}{4\pi} \sum_{l \neq k} \frac{(-1)^m (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l)}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|^3} G\left(\frac{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|}{x_0}\right), \quad (1e)$$

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_k}{d\tau^2} = \frac{\mu}{4\pi} \sum_{l \neq k} \frac{(-1)^m (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l)}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|^3} G\left(\frac{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l|}{x_0}\right). \quad (1i)$$

Здесь $\mathbf{x}_k = \mathbf{r}_k N_e^{1/3}$ — безразмерный радиус-вектор k -й частицы; $\tau = \omega_L t$ — безразмерное время; $\mu = m_e/m_i$ — отношение массы электрона к массе иона (в расчетах использовались два значения массы ионов: равное массе протона $\mu = 1/1836$ и массе электрона $\mu = 1$); $m = 1$ для частиц с разными знаками зарядов, $m = 2$ для частиц с одинаковыми знаками зарядов; $G(x) = 1$ при $x > x_0$, $G(x) = 8 - 9x + 2x^2$ при $x \leq x_0$ — функция, ограничивающая кулоновский потенциал на близких расстояниях (частицы считаются заряженными сферами малого радиуса $r_0/2$, $x_0 = r_0 N_e^{1/3}$); суммирование ведется по всем $2n$ частицам; индекс k -й частицы пробегает в уравнениях для электронов (1e) и ионов (1i) значения от 1 до n .

Начальные условия задавались с помощью генератора псевдослучайных чисел в соответствии с однородным распределением электронов и ионов по пространству и в соответствии с максвелловским распределением по скоростям с начальной температурой T_0 ; граничные условия соответствовали зеркально отражающим стенкам (подробнее см. [1,2]).

Степень идеальности (или неидеальности) плазмы характеризуется величинами

$$\gamma = \delta^{1/3} = \frac{e^2 (2N_e)^{1/3}}{T_e},$$

$$\delta = \frac{2e^6 N_e}{T_e^3}, \quad n_D = \frac{1}{\sqrt{36\pi\delta}}, \quad (2)$$

где $n_D = 4\pi r_D^3 N_e / 3$ — число частиц одного заряда в дебаевской сфере, $r_D = \sqrt{T_e / (8\pi e^2 N_e)}$ — дебаевский радиус, величина $e^2 N_e^{1/3}$ может служить естественной единицей измерения энергии.

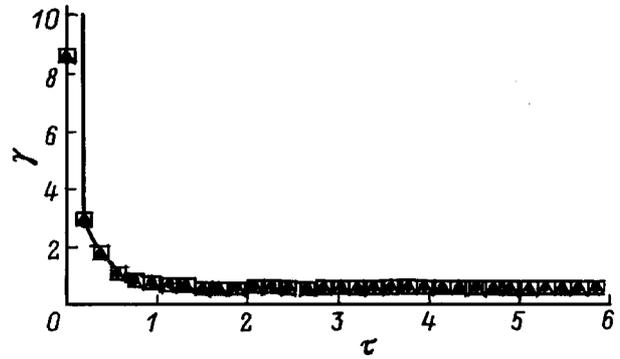


Рис. 1. Релаксация степени идеальности плазмы γ к квазистационарному значению. \square — $N_i = N_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$; $T_0 = 0.001 \text{ эВ}$; \triangle — $N_i = N_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$; $T_0 = 0.01 \text{ эВ}$; \bullet — $N_i = N_e = 10^{20} \text{ см}^{-3}$; $T_0 = 0.1 \text{ эВ}$; сплошная кривая — $\gamma = 0.5/\tau + 0.4$; полное число частиц $2n = 1000$; $\mu = m_e/m_i = 3 \cdot 10^{-7}$.

В данной работе температура электронов вычислялась как две трети их кинетической энергии

$$T_e = \frac{2}{3} \sum_{k=1}^{k=n} \frac{m_e v_k^2}{2}, \quad (3)$$

где $v_k = dr_k/dt$ — скорость k -го электрона.

Опыт предыдущих расчетов показывает, что эта величина близка к той, которая вычисляется на основе получаемого распределения по скоростям.

Вычислялись также физические величины для различных интервалов полной энергии электрона ε . При этом для полной энергии отдельной частицы использовалось выражение:

$$\varepsilon_j = \frac{m_j v_j^2}{2} + q_j \sum_{k=1}^{2n} \frac{q_k}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} G(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|/r_0). \quad (4)$$

Здесь $G_1(x) = 1$ при $x \geq 1$; $G_1(x) = 2.4x - 4x^3 + 3x^4 - 0.4x^5$ при $x < 1$ — функция, учитывающая искажение кулоновского потенциала взаимодействия на расстоянии между заряженными частицами меньшем суммы их радиусов r_0 .

б) У н и в е р с а л ь н ы е р е л а к с а ц и о н н ы е к р и в ы е. Если рассматривать достаточно большое число частиц и достаточно низкую начальную температуру, то степень идеальности плазмы будет функцией только безразмерного времени. Это подтверждается численными расчетами (рис. 1), проведенными для разных значений плотности N_e и разных значений начальной температуры T_0 , выбранных такими, чтобы начальное значение параметра идеальности для этой серии расчетов совпадало. При этом рассматривалась ситуация, когда ионы можно считать неподвижными ($\mu \rightarrow 0$), а начальная средняя энергия электронов мала ($T_0 \rightarrow 0$). Едва заметное различие результатов расчетов для разных значений плотности определяется, по-видимому, точностью вычислений. Результаты численных расчетов

релаксации средней кинетической энергии хорошо аппроксимируются простым выражением

$$\gamma = \frac{a}{\tau} + b, \quad (5)$$

где a и b — подгоночные параметры (для H -плазмы $a \approx 0.5$, $b \approx 0.35$).

Были также проведены расчеты для разных ионных конфигураций (они определялись заданием разных начальных значений в генераторе псевдослучайных чисел). Было показано, что для разных ионных конфигураций временная зависимость степени идеальности хорошо описывается тем же простым выражением.

Из приведенных выше результатов следует, что путем задания начальных условий невозможно получить плазму с произвольно большой скоростью неидеальности. Даже если начальное состояние классической кулоновской плазмы сильно неидеально ($\gamma \gg 1$), то за сравнительно короткий промежуток времени порядка обратной ленгмюровской частоты происходит нагрев электронов и плазма становится ближе к идеальной. Предельные значения параметров γ , δ , n_D , характеризующих степень идеальности установившегося метастабильного состояния, составляют $\gamma = 0.4 \pm 0.1$, $\delta = 0.076 \pm 0.05$, $n_D = 0.34$. Например, для плотности электронов $N_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ нижняя граница температуры электронов составляет $T_e \approx 0.2 \text{ эВ}$.

Тот факт, что время релаксации определяется ленгмюровской частотой, не противоречит результатам работ [9,10] (см. также [7,8]), где время релаксации определяется не ленгмюровской частотой, а временем пролета электроном среднего межчастичного расстояния $\tau_{ei} = N_i^{-1/3}/\nu_e$. Дело в том, что из-за сильного нагрева в рассматриваемом случае низкой начальной температуры скорость электрона (и соответственно время межчастичного пролета) определяется не начальной малой средней скоростью, а энергией кулоновского взаимодействия и ленгмюровской частотой

$$\nu_e \cong \sqrt{\frac{2e^2 N_e^{1/3}}{m_e}}; \quad \tau_{ei} = N_i^{-1/3}/\nu_e \cong \sqrt{\frac{m_e}{2e^2 N_e}} = \sqrt{2\pi\omega_L^{-1}}. \quad (6)$$

В случае же, когда начальная температура велика (плазма идеальна), временные автокорреляционные функции потенциальной энергии отдельных электронов и потенциала, создаваемого движущимися частицами в центре куба, распадаются за время τ_{ei} (подробнее см. [7–10]).

Обсуждаемое здесь ограничение на степень неидеальности, разумеется, относится к изолированной плазме, не подвергшейся внешнему воздействию (подробнее см. [1,2]). Можно было бы пытаться создать более неидеальную плазму, охлаждая ее за счет внешнего воздействия, например, помещая в термостат с холодными стенками или моделируя охлаждающие неупругие

столкновения. Однако, как было показано ранее [6–8] (см. также [1,2]), внешнее стохастическое воздействие с обменом энергии разрушает метастабильное состояние и стимулирует релаксационные процессы, в частности рекомбинацию. Вопрос о том, каким путем можно было бы получить сильно неидеальную метастабильную плазму, нуждается в дополнительном исследовании.

в) Теоретическое вычисление предельного параметра неидеальности. Рассмотрим случай равных масс положительно и отрицательно заряженных частиц $m_i = m_e$. Дело в том, что представленное ниже теоретическое рассмотрение можно построить лишь для полностью установившегося метастабильного состояния. В случае же сильно отличающихся масс нет возможности проследить релаксацию до той стадии, когда выровняются температуры электронов и ионов.

Из представлений о том, что диффузия и дрейф частиц по энергетической оси в области отрицательных энергий определяются микрополями, ранее (см., например, [1,2]) получено следующее выражение для функции распределения частиц по полной энергии $y = \varepsilon/T_e$:

$$f(y) = \frac{2C}{\sqrt{\pi}} \begin{cases} \sqrt{y} \exp(-y), & y > \alpha\gamma, \\ C_3 \exp(C_1 y + C_2 y^2/2), & |y| \leq \alpha\gamma, \\ C_4 \exp(\beta y/\gamma), & y < -\alpha\gamma. \end{cases}$$

Здесь

$$C_1 = [-1 + 1/(2\alpha\gamma) + \beta/\gamma + \beta/\gamma]/2,$$

$$C_2 = [-1 + 1/(2\alpha\gamma) + \beta/\gamma - \beta/\gamma]/(2\alpha\gamma),$$

$$C_3 = \alpha^{1/2} \sqrt{\gamma} \exp[-\alpha\gamma(1 + C_1 + C_2\alpha\gamma/2)],$$

$$C_4 = \alpha^{1/2} \sqrt{\gamma} \exp[\alpha\beta - \alpha\gamma(1 + 2C_1)],$$

$$C^{-1} = 1 - (2/\sqrt{\pi}) \cdot F(3/2, \alpha\gamma) + (2C_3/\sqrt{\pi})$$

$$\times \int_{-\alpha\gamma}^{\alpha\gamma} \exp(C_1 y + C_2 y^2/2) dy + (2C_4\gamma/\sqrt{\pi} \cdot \beta) \exp(-\alpha\beta),$$

где $\alpha = 1.5$, $\beta = 0.4$; $F(a, x) = \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt = \gamma(a, x)$ — неполная гамма-функция.

С помощью функции (1) можно найти полную энергию системы, приходящуюся на одну частицу $\langle y \rangle = 3/2 + 2\langle u \rangle$. Здесь $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x(y) f(y)$ — среднее значение величины x ; u — потенциальная энергия, приходящаяся на одну частицу и измеренная в единицах T_e .

Полагая, что в начальный момент времени как кинетическая, так и потенциальная энергии близки к нулю (это соответствует однородному по пространству начальному распределению с малой температурой), и учитывая, что при зеркальном отражении от стенок энергия сохраняется, получаем в этом случае для метастабильного состояния $\langle u \rangle = 3/4$. Зависимость величины $\langle u \rangle$ от δ

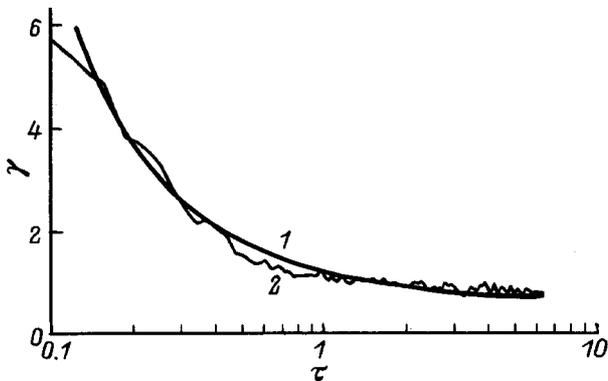


Рис. 2. Релаксация степени идеальности плазмы γ к квазистационарному значению в ион-ионной плазме. $\mu = 1$; остальные величины те же, что и на рис. 2; 1 — $\gamma = 0.55/\tau + 0.64$, 2 — расчет.

протабулирована ранее. Согласно расчетам, этому значению энергии соответствует $\delta = 0.26$ и соответственно $\gamma = 0.64$. Результаты численного моделирования ион-ионной плазмы (рис. 2) хорошо описываются функцией (5) при $a = 0.55$ и $b = 0.64$.

Ранее было показано [1,2], что использованная выше функция хорошо описывает распределения, полученные на основе моделирования из первопринципов, и приводит к выражениям для термодинамических величин, переходящим в пределе слабого кулоновского взаимодействия в результаты дебаевской теории. Согласие расчетного значения предельной величины параметра неидеальности со значением, полученным в результате прямого моделирования динамики многих частиц, указывает на то, что развитые ранее теоретические представления хорошо описывают и новые данные.

Парные корреляционные функции частиц

а) О вычислении корреляционных функций. Как известно, парные корреляционные функции $w_{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ дают вероятность найти одновременно частицы a и b вблизи точек \mathbf{r}_a и \mathbf{r}_b . В пространственно однородной изотропной плазме эти функции зависят лишь от расстояния между частицами $r = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$. Соответственно корреляционные функции вычислялись следующим образом.

Интервал, равный половине длины ребра куба ($0 < r < a/2$), разбивался на большое число (в расчетах — двести) малых интервалов. На рассматриваемом временном промежутке перебирались все расстояния r_{ij} между теми частицами, для которых определяется корреляционная функция (например, электронами и/или ионами) и вычислялось число попаданий частиц в каждый из малых интервалов. При вычислении r_{ij} использовались периодические граничные условия. Например, если оказывалось, что разность проекций радиус-векторов частиц на ось x выходит за половину длины

ребра куба $x_i - x_j > a/2$, то вместо нее бралась величина $x_i - x_j - a/2$. При $x_i - x_j < -a/2$ бралось $x_i - x_j + a/2$. Подчеркнем, что эти стандартные периодические граничные условия использовались нами не при решении динамических уравнений, а лишь при вычислении корреляционных функций.¹ Тем самым как бы полагалось, что все пространство заполнено плотно упакованными кубиками с зеркально отражающими стенками. Это делается для того, чтобы избежать нефизического спада корреляционных функций на расстояниях, сравнимых с половиной длины ребра куба.

В результате описанной процедуры вычислялась величина, пропорциональная $r^2 w_{ab}$. Нормировка корреляционной функции определялась выражением

$$4\pi \int_0^{a/2} r^2 dr w_{ab}(r) = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3.$$

При этом считалось, что количество попаданий в данный малый интервал задает значение функции $r^2 w_{ab}$ в центре интервала.

Вычислялись электрон-ионные и электрон-электронные корреляционные функции. Кроме того, электрон-ионные корреляции характеризовались функциями, вычисленными для различных энергетических областей: а) свободных электронов с энергией $\varepsilon > 1.5\gamma T_e$; б) электронов "квазиконтинуума" $-1.5\gamma T_e < \varepsilon < 1.5\gamma T_e$; в) электронов, которые условно можно считать связанными, $-1.5\gamma T_e > \varepsilon$.

б) Результаты расчетов. Вычисленные электрон-ионные и электрон-электронные корреляционные функции сравнивались с теоретическими выражениями, следующими из боголюбовской теории (см., например, [11]),

$$w_{ab} = 1 + (-1)^m \frac{e^2}{T} \frac{\exp(-r/r_D)}{r} = 1 + (-1)^m \gamma \frac{\exp(-2^{4/3} \sqrt{\pi} \gamma x)}{2^{1/3} x}. \quad (7a)$$

Здесь, как и в (2): $x = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b| N_e^{1/3}$ — безразмерное межчастичное расстояние; $m = 1$, для частиц с разными знаками зарядов, $m = 2$, для частиц с одинаковыми знаками зарядов; величина γ определена формулой (3).

Вообще говоря, выражение (7a) больше подходит для случая равных масс заряженных частиц. В электрон-ионной плазме рассматривались времена, на которых экранирование ионами не успевает установиться. В этом случае для описания экранировки электронами лучше использовать электронный дебаевский радиус:

$$r_{D_e} = \sqrt{\frac{T_e}{4\pi e^2 N_e}} = \sqrt{2} r_D.$$

¹ Если периодические граничные условия используются в решении динамической задачи, это отдельно оговаривается. Обсуждение ненадежности использования периодических граничных условий в решении динамической задачи при исследовании фундаментальных свойств системы многих кулоновских частиц см. в [6].

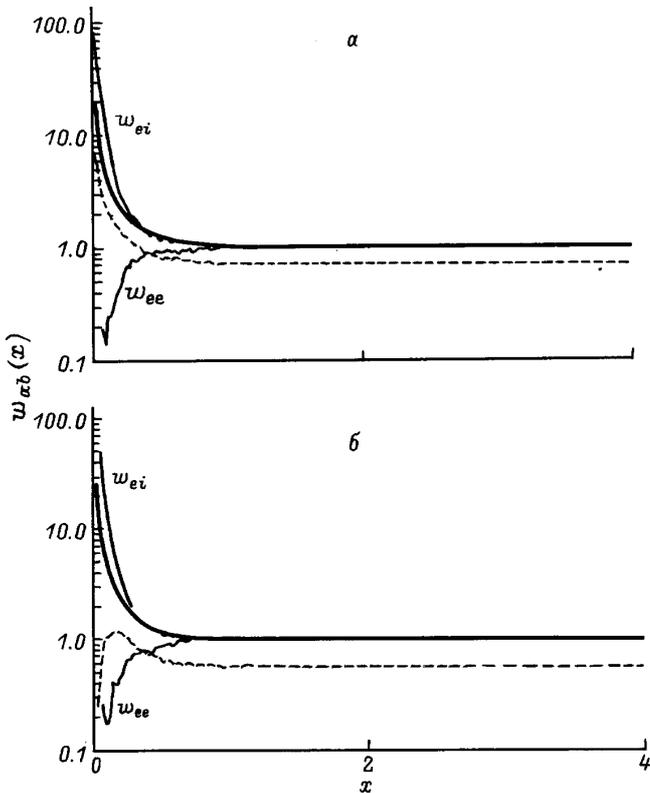


Рис. 3. Электрон-ионные ($e - i$) и электрон-электронные ($e - e$) парные корреляционные функции. Начальные условия взяты на конечный момент времени расчетов по установлению метастабильного состояния ($t_0 \sim T_L$, где $T_L = 2\pi/\omega_L = \sqrt{2\pi m_e/e^2 N_e}$); $x = rN_e^{1/3}$, $2n = 1024$; $N_i = N_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$; время наблюдения эволюции системы $t = T_L$; $a - (m_i = 1836m_e)$; средняя по времени температура $T_e = 0.17 \text{ эВ}$; жирная кривая — $w_{ei} = 1 + (0.394/x)e^{-2.22x}$, штриховая — распределение электронов с энергией $\varepsilon > -1.5\gamma T_e$; $b - m_i = m_e$; средняя по времени температура $T_e = 0.12 \text{ эВ}$; жирная кривая — $w_{ei} = 1 + (0.558/x)e^{-3.74x}$, штриховая — то же, что и на рис. 3, a .

Соответственно, для корреляционной функции имеем:

$$w_{ab} = 1 + (-1)^m \frac{e^2}{T} \frac{\exp(-r/r_{De})}{r} = 1 + (-1)^m \gamma \frac{\exp(-2^{5/6} \sqrt{\pi} \gamma x)}{2^{1/3} x}. \quad (76)$$

Сопоставление вычисленных корреляционных функций с теоретическими обнаруживает неплохое согласие (рис. 3). Некоторые отличия возникают на совсем малых расстояниях ($x < 0.5$), где существенный вклад дают связанные частицы. В случае H -плазмы распределение для частиц с энергией $\varepsilon > -1.5\gamma$ (свободных электронов и электронов квазиконтинуума) с точностью до сдвига, обусловленного нормировкой, практически совпадает с теоретической кривой. В случае частиц с равной массой распределение свободных и квазиконтинуальных частиц

в области малых расстояний спадает, поскольку в случае равных масс из-за стеночной рекомбинации (подробнее см. [12]) связанных частиц больше.

Удивительно, что согласие результатов моделирования с теорией имеет место вне рамок применимости дебаевской модели. Во-первых, плазма неидеальна; во-вторых, согласие имеет место вплоть до расстояний, меньших как дебаевского радиуса, так и среднего межчастичного расстояния. Этот факт согласуется с результатами предыдущих работ [9,10] (см. также [7,8]), где обнаружена существенная "затяжка" применимости дебаевских представлений, а именно: а) дебаевские термодинамические функции совпадали с расчетными вплоть до $\delta \sim 1$; б) средний по большому промежутку времени потенциал вокруг неподвижного заряда, помещенного в центр куба, совпадал с дебаевской формулой для экранировки и на малых расстояниях меньших среднего межчастичного.

Дипольный момент системы кулоновских частиц

1. Результаты расчетов

а) З а в и с и м о с т ь о т в р е м е н и. Коллективные движения электронов системы должны проявляться, в частности, в зависимости от времени полного дипольного момента всей системы n положительно и n отрицательно заряженных частиц

$$\mathbf{D}(t) = \sum_{k=1}^{2n} q_k \mathbf{r}_k(t) = e \left(\sum_{j=1}^n \mathbf{r}_j^{(+)} - \sum_{k=1}^n \mathbf{r}_k^{(-)} \right). \quad (8)$$

Здесь $\mathbf{r}_j^{(+)}$, $\mathbf{r}_k^{(-)}$ — траектории соответственно положительно и отрицательно заряженных частиц. Результаты расчетов (рис. 4) показывают, что электроны плазмы совершают некоторое упорядоченное движение, которое можно трактовать как коллективные колебания. Точнее говоря, центр тяжести электронов (а в случае равных масс и центр тяжести ионов) совершает периодические колебания, которые становятся заметными после суммирования всех радиус-векторов электронов. Суммирование зануляет смещения за счет хаотического движения и на фоне этого хаотического движения становится заметной регулярная составляющая.

Амплитуда коллективных колебаний невелика, она соответствует смещению каждого электрона на расстояние порядка $1/20$ от среднего межчастичного расстояния. Характерный временной масштаб коллективных движений по порядку величины согласуется с ленгмюровской частотой. Однако в точности они не совпадают: в проведенных нами нескольких сериях расчетов частота обнаруженных колебаний в $1.5-2$ раза меньше частоты ленгмюровских колебаний для H -плазмы. В случае равных масс частота коллективных колебаний, как и следовало ожидать, примерно в $\sqrt{2}$ раз больше, чем для

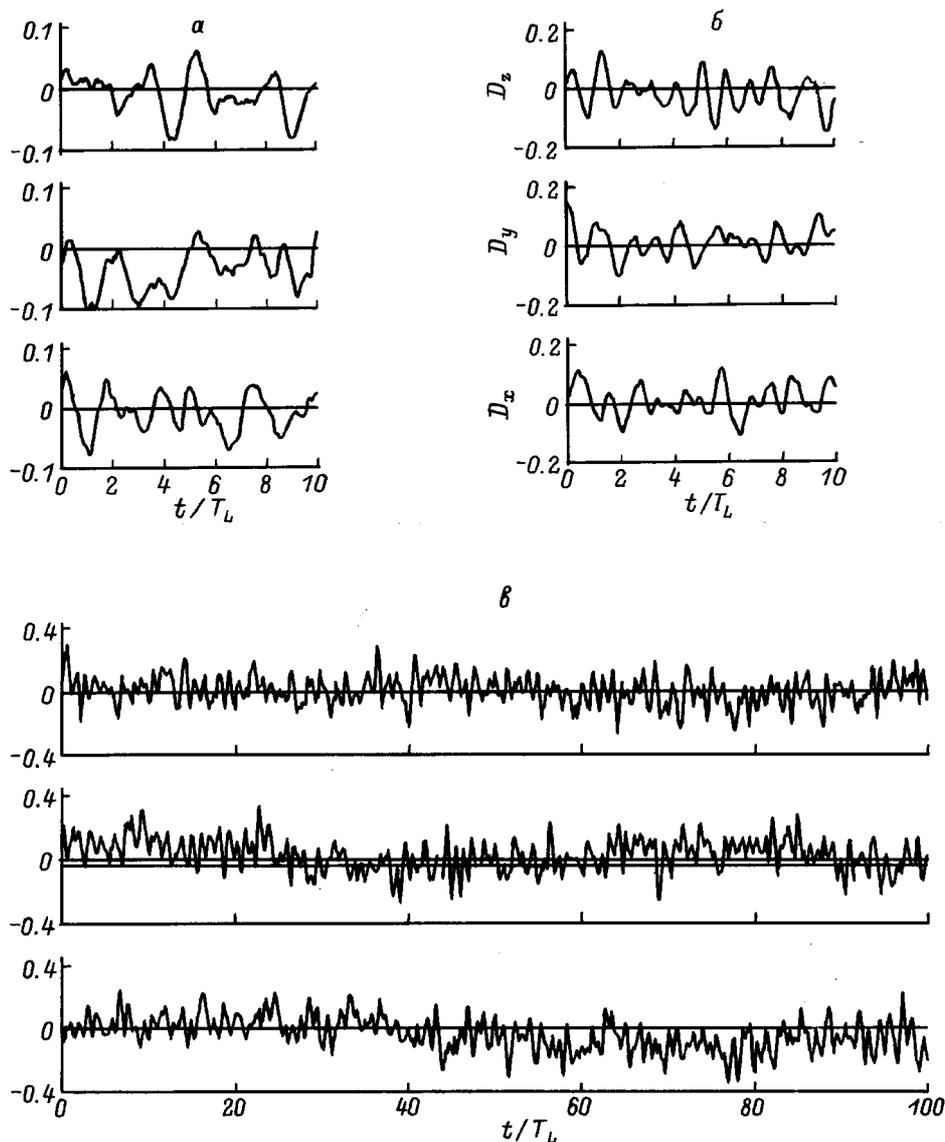


Рис. 4. Зависимость от времени проекций полного дипольного момента системы кулоновских частиц на оси x , y , z (момент измерен в единицах $neN_e^{-1/3}$). *a* — короткий расчет, $m_i = 1836$, начальные температуры $T_{i0} = 0.22$ эВ, $T_{e0} = 0.2$ эВ, $2n = 1024$, $N_i = N_e = 10^{17}$ см $^{-3}$; время наблюдения эволюции системы $0 < t < 10T_L$, в ходе расчета электронная температура возросла до $T_e = 0.25$ эВ; *б* — короткий расчет, $m_i = m_e$, начальная температура $T_0 = 0.43$ эВ, $2n = 1024$, $N_i = N_e = 10^{17}$ см $^{-3}$, $0 < t < 10T_L$, $T_e = 0.45$ эВ; *в* — длинный расчет, H -плазма, $T_{i0} = 0.22$ эВ, $T_{e0} = 0.2$ эВ, $2n = 128$, $N_i = N_e = 10^{17}$ см $^{-3}$, $0 < t < 100T_L$, в ходе расчета электронная температура возросла до $T_e = 0.3$ эВ.

случая тяжелых ионов, и тоже в 1.5–2 раза меньше частоты ленгмюровских колебаний, которая должна иметь место для плазмы с равными массами положительных и отрицательных частиц (в этом случае в выражении для частоты ленгмюровских колебаний надо заменить m_e на приведенную массу пары частиц $m_e/2$).

б) Корреляторы дипольного момента. Хотя циклический характер зависимости от времени дипольного момента системы виден "на глаз", необходимы объективные характеристики, доказывающие наличие коллективных колебаний системы. В связи с этим были вычислены временные корреляторы различных проекций

дипольного момента

$$R_{\alpha\beta}(\tau) = \frac{\frac{1}{t} \int_0^t D_\alpha(t') D_\beta(t' + \tau) dt'}{\max\left(\frac{1}{t} \int_0^t D_\alpha(t') D_\beta(t' + \tau) dt'\right)}. \quad (9)$$

Здесь α, β пробегает значения x, y, z , соответствующие проекциям дипольного момента на различные оси координат. Ввиду симметрии по α, β достаточно вычислять для каждого расчета лишь 6 из 9 корреляторов. Результаты расчетов (рис. 5) показывают, что корреляционные функции имеют периодический характер и период

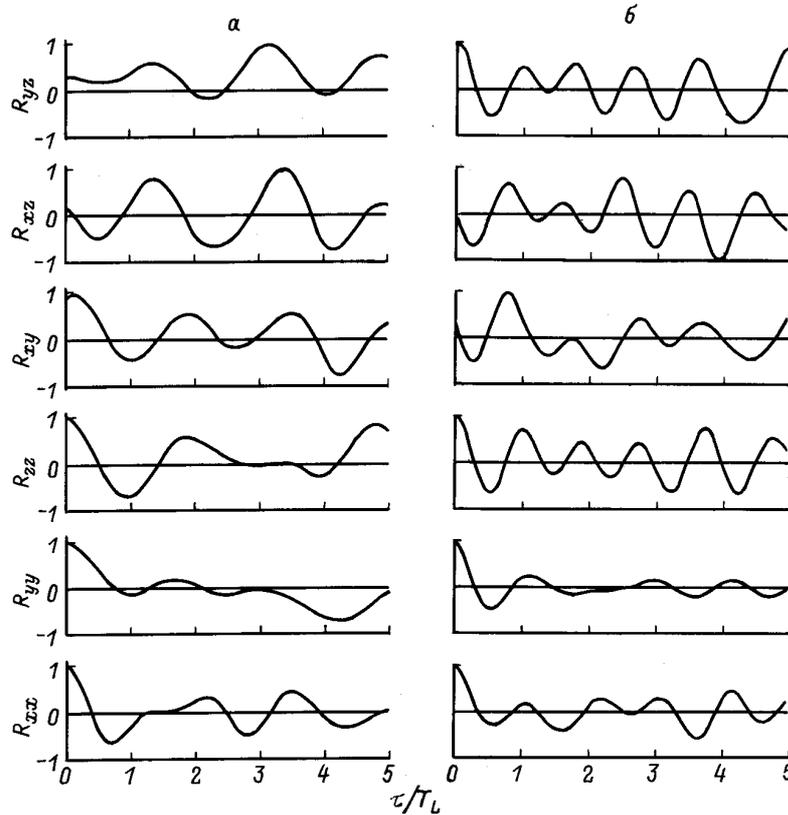


Рис. 5. Зависимость от времени корреляторов проекций полного дипольного момента системы кулоновских частиц. Параметры плазмы и расчета те же, что и на рис. 4, а, б; а — $m_i = 1836m_e$, б — $m_i = m_e$.

их колебаний также несколько больше ленгмюровского периода

$$T_L = \frac{2\pi}{\omega_L} = \sqrt{\frac{2\pi m_e}{e^2 N_e}}.$$

Особенно примечательно то, что взаимные корреляционные функции R_{xy} , R_{xz} , R_{yz} так же периодичны, как и автокорреляционные функции R_{xx} , R_{yy} , R_{zz} , причем периодичность взаимных корреляторов даже более выражена. Можно сказать, что вектор дипольного момента системы кулоновских частиц ведет себя подобно гармоническому осциллятору, находящемуся под внешним воздействием.

в) О спектре коллективных колебаний. Для получения спектра коллективных колебаний вычислялись фурье-преобразования от корреляторов²

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \left| \frac{1}{2\pi t} \int_0^l d\tau e^{i\omega\tau} R_{\alpha\beta}(\tau) \right|$$

$$= \sqrt{\left(\frac{1}{2\pi t} \int_0^l d\tau R_{\alpha\beta}(\tau) \cos \omega t \right)^2 + \left(\frac{1}{2\pi t} \int_0^l d\tau R_{\alpha\beta}(\tau) \sin \omega t \right)^2}. \quad (10)$$

² Вычисление фурье-компонент непосредственно от проекций полного дипольного момента не дало интересных результатов: спектр почти полностью исчезал на фоне шумов.

Полученные спектры (рис. 6) демонстрируют тот факт, что имеют место коллективные колебания с частотой, несколько меньшей ленгмюровской. Однако наличие шумов и сравнительно небольшое число частиц в расчетах не дают пока возможности надежно определить контур спектральной линии дипольного излучения метастабильной плазмы.

2. О коллективных колебаниях

Следует прежде всего напомнить, что в рассматриваемой области энергий и для неидеальной плазмы с $n_D < 1$, $\gamma \sim 1$ нет малого параметра, необходимого при построении количественной теории. В обсуждении результатов численных расчетов приходится опираться на рассуждения качественного характера вблизи границы применимости принятых теоретических представлений.

а) Ленгмюровские колебания и колебания дипольного момента. Для плоской продольной волны в плазме из уравнения Власова следует дисперсионное соотношение, связывающее волновое число $k = 2\pi/\lambda$ (λ — длина волны) с частотой ω коллективных колебаний электронов (см., например, [13,14]),

$$\omega^2 = \omega_L^2 + 3k^2 \nu_e^2 + i\gamma_L \omega_L^2 = \omega_L^2 \cdot (1 + 6k^2 r_D^2 + i\gamma_L). \quad (11)$$

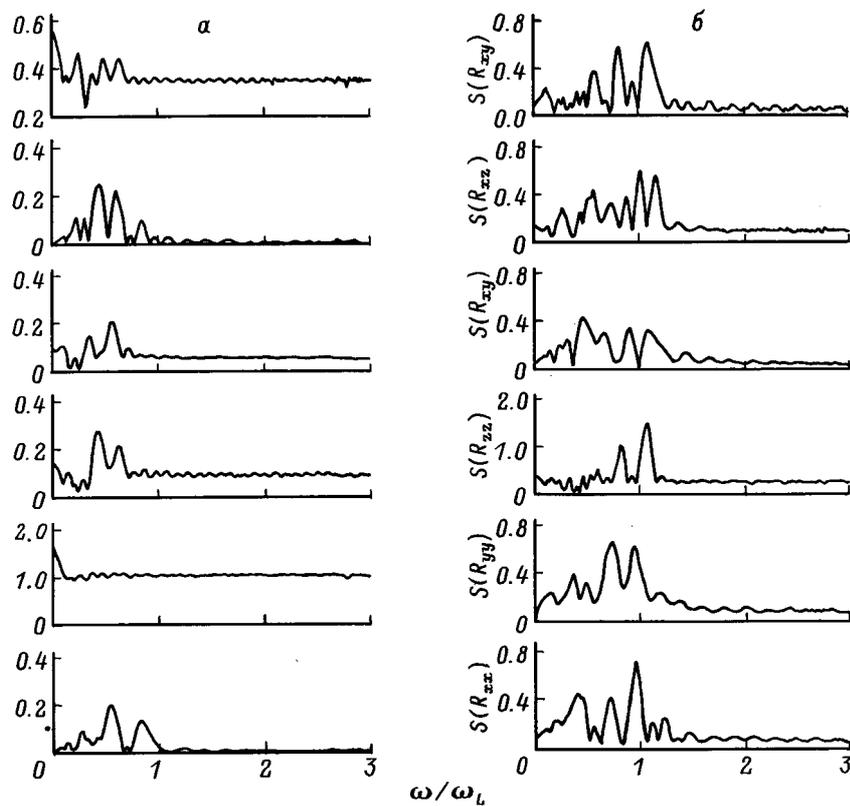


Рис. 6. Спектры корреляторов дипольного момента системы. Параметры плазмы и расчета те же, что и на рис. 5: *а* — *H*-плазма, *б* — $m_i = m_e$.

Здесь

$$\gamma_L = \frac{\sqrt{\pi}}{(2k^2 r_{De}^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{1}{2k^2 r_{De}^2}\right)$$

— декремент бесстолкновительного затухания, найденный Ландау (выражение приведено для максвелловского распределения электронов). Дисперсионное уравнение (11) справедливо для достаточно длинноволновых ленгмюровских колебаний, когда

$$k^2 r_{De}^2 \sim k^2 \nu_{Te}^2 / \omega_L^2 \ll 1.$$

При выполнении этого условия действительная добавка к ленгмюровской частоте мала, а декремент бесстолкновительного затухания экспоненциально мал. Все коллективные колебания электронов происходят с частотой, близкой к ленгмюровской, немного большей ее.

Итак, малая поправка лишь увеличивает частоту колебаний, тогда как моделирование показывает, что частота колебаний дипольного момента системы меньше ленгмюровской. Не исключено, что это связано с ограниченностью рассматриваемого объема. Однако при длине ребра куба $a = (n/N_e)^{1/3} = 1.7 \cdot 10^{-5}$ см поправка к ленгмюровской частоте в дисперсионном уравнении еще не очень велика

$$\omega = \omega_L \sqrt{1 + 6[(2\pi/a)r_D]^2} \approx 1.17 \cdot \omega_L.$$

Дело, возможно, в том, что для ленгмюровских колебаний рассматриваемая плазма не может считаться идеальной. Хотя параметр $\delta = 2e^6 N_e / T_e^3$, характеризующий степень идеальности термодинамических величин, в рассматриваемом случае еще невелик $\delta = 0.075$, число электронов в дебаевской сфере уже меньше единицы $n_D = (4\pi/3)r_D^3 N_e = 1/\sqrt{36\pi\delta} = 0.34$, дебаевский радиус заметно меньше среднего межчастичного расстояния $r_D N_e^{1/3} \sim 0.35$. Соответственно если в оценке заменить дебаевский радиус средним межчастичным расстоянием как большей величиной, то поправка к частоте колебаний окажется сравнимой с ленгмюровской частотой $\omega \approx 2 \cdot \omega_L$.

Тот факт, что наблюдается обратный эффект — частота коллективных колебаний оказывается меньше, а не больше ленгмюровской, можно связать с затуханием. Как известно, у гармонического осциллятора с собственной частотой ω_0 и коэффициентом затухания $\omega_0 \alpha$ частота колебаний уменьшается с ростом α : $\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \alpha^2}$. Однако в действительности не видно уменьшения амплитуды колебаний со временем даже на довольно длительном промежутке времени (рис. 5, б). В связи с этим необходимо предположить, что колебания имеют место под воздействием какой-то внешней вынуждающей силы.

Кроме того, возникает естественный вопрос о природе затухания, сдвигающего спектр колебаний в низкоча-

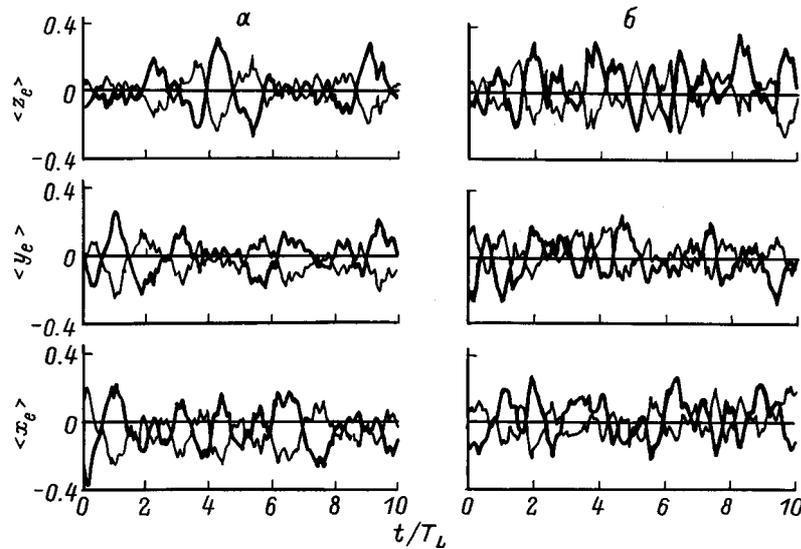


Рис. 7. Зависимость от времени проекций радиус-вектора центра тяжести электронов на оси x , y , z . Сплошные жирные кривые — центр тяжести свободных электронов; тонкие — центр тяжести электронов с энергией $\varepsilon < 1.5\gamma T_\varepsilon$; параметры плазмы и расчета те же, что и на рис. 5, а, б.

стотную область. Поскольку в рассматриваемой области параметров декремент бесстолкновительного затухания сравним с единицей, то уменьшение частоты коллективных колебаний электронов можно связать с бесстолкновительным затуханием. Однако это бесстолкновительное затухание может быть связано не с взаимодействием волны и быстрых электронов, находящихся с ней в фазе, как это имеет место для затухания Ландау. Оно может быть обусловлено взаимодействием коллективного поля и квазисвязанных частиц.

б) К е п л е р о в с к а я ч а с т о т а. Как известно, период обращения частицы в кулоновском поле зависит только от энергии связи $|\varepsilon|$ и не зависит, в частности, от момента импульса. При этом движение совершается с кеплеровской угловой частотой

$$\omega_\varepsilon = \sqrt{\frac{8|\varepsilon|^3}{e^4 m_e}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega_L \left(\frac{|\varepsilon|}{e^2 N_e^{1/3}} \right)^3.$$

Итак, когда энергия связи электрона порядка энергии взаимодействия с другими электронами плазмы $|\varepsilon| \sim e^2 N_e^{1/3}$ (при этом радиус кеплеровской орбиты порядка среднего межчастичного расстояния), электрон вращается с частотой порядка ленгмюровской $\omega_\varepsilon \sim \omega_L$. Соответственно этот электрон должен эффективно взаимодействовать с коллективными колебаниями электронов плазмы — возбуждать в плазме колебания и испытывать воздействие плазменных колебаний.

Разумеется, приведенное выше дисперсионное уравнение нельзя непосредственно использовать для описания взаимодействия связанных электронов с коллективными колебаниями. Дело в том, что характерный размер области взаимодействия (радиус орбиты электрона) меньше

или порядка среднего расстояния между зарядами. Однако можно представить некоторые результаты численных расчетов, косвенно свидетельствующие в пользу той точки зрения, что колебания квазисвязанных и свободных электронов сильно взаимодействуют. Как видно из рис. 7, центры масс свободных и квазисвязанных электронов колеблются в противофазе, так что вклад колебаний свободных электронов в дипольный момент в значительной мере компенсируется обратным движением электронов с энергией $\varepsilon < 1.5\gamma$. Противофазный характер колебаний свидетельствует, на наш взгляд, о вынужденном характере колебаний квазисвязанных электронов, возбуждаемых ленгмюровскими колебаниями свободных частиц.

в) П р о с т е й ш а я м о д е л ь я в л е н и я п р о т и в о ф а з н о с т и к о л е б а н и й. Отметим прежде всего, что основной вклад в колебания дипольного момента и центра масс дают возмущения с бесконечной длиной волны (все электронное распределение по пространству целиком смещается в какую-либо сторону). Предположим, что свободные электроны системы сместились на величину x_1 . Это смещение приведет к возникновению электрического поля $E_1 = 4\pi e N_{e1} x_1$. При $N_{e1} = N_e$, т.е. когда учитываются только свободные электроны, динамика движения центра масс свободных электронов определится уравнением

$$m \ddot{x}_1 = -eE_1, \quad \text{или} \quad \ddot{x}_1 + \omega_L^2 x_1 = 0.$$

Как и следовало ожидать, свободные электроны будут колебаться с ленгмюровской частотой. Предположим теперь, что эти колебания свободных электронов вызывают изменение движения связанных электронов. В этом случае поляризация связанных электронов будет частично компенсировать движение свободных электронов и

результатирующее поле составит величину

$$E = 4\pi N_e(\alpha_1 x_1 - \alpha_2 x_2).$$

Здесь x_2 — смещение связанных электронов; $\alpha_1 = N_{e1}/N_e$, $\alpha_2 = N_{e2}/N_e$ — соответственно доли свободных и связанных электронов. При этом уравнение движения отдельного связанного электрона имеет вид

$$\ddot{x} - F/m_e = -eE,$$

где F — проекция на ось x кулоновской силы, действующей на отдельный электрон.

Если для простоты считать связанный электрон в отсутствие внешнего поля как бы осциллятором, колеблющимся с кеплеровской частотой, то уравнения движения центров масс связанных и свободных электронов примут вид

$$\ddot{x}_1 = -\omega_L^2(\alpha_1 x_1 - \alpha_2 x_2), \quad \ddot{x}_2 + \omega_\varepsilon^2 = -\omega_L^2(\alpha_1 x_1 - \alpha_2 x_2).$$

Рассмотрим наиболее простую ситуацию, когда связанных электронов, участвующих в коллективных колебаниях, мало и смещение их центра тяжести относительно положения равновесия малое. Тогда, полагая $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$, получаем

$$x_1 = a_1 \cos(\omega_L t + \varphi_1),$$

$$x_2 = a_2 \cos(\omega_\varepsilon t + \varphi_2) - \frac{a_1}{1 - \omega_L^2/\omega_\varepsilon^2} \cos(\omega_L t + \varphi_1).$$

Здесь a_1, a_2 — амплитуды; φ_1, φ_2 — начальные фазы колебаний. Знак "минус" перед вторым членом во втором выражении отражает тот факт, что свободные и связанные электроны колеблются в противофазе. Это противофазность наиболее заметна для электронов, близких к резонансу, т.е. для тех, которые вращаются с кеплеровской частотой, близкой к ленгмюровской. Энергия связи таких электронов $\varepsilon \approx 1.9 \cdot e^2 N_e^{1/3}$.

Разумеется, можно усложнить рассмотрение: а) аккуратно провести усреднения, приводящие к колебательным уравнениям для центров тяжести; б) ввести затухание; в) точно решить колебательные уравнения (не использовать приближение малости числа связанных электронов), и т.д. Однако пока не видно, приведет ли это к более точным количественным результатам. В то же время суть явления противофазности колебаний видна и из приведенной простейшей модели.

Заключение

В заключение сформулируем основные выводы работы.

1. При низкой начальной температуре электронов, соответствующей сильно неидеальному начальному состоянию плазмы, имеет место стадия релаксации температуры к более высокому значению. Стадия релаксации характеризуется универсальной функцией (5).

2. Имеет место предельное значение степени неидеальности плазмы ($\gamma \approx 0.4$), которое может быть достигнуто в метастабильном состоянии, в отсутствие внешнего воздействия.

3. Корреляционные функции положений заряженных частиц, получаемые на основе расчетов динамики многих частиц обнаруживают неплохое согласие с выражениями, получаемыми на основе боголюбовской теории в дебаевском приближении, причем согласие результатов моделирования с теорией имеет место вне рамок применимости дебаевской модели: для неидеальной плазмы и вплоть до расстояний меньших как дебаевского радиуса, так и среднего межчастичного расстояния. Этот факт согласуется с результатами предыдущих работ [9,10] (см. также [7,8]), где обнаружена существенная "затяжка" применимости дебаевских представлений.

4. Результаты расчетов полного дипольного момента системы заряженных частиц показывают, что центр тяжести электронов (а в случае равных масс и центр тяжести ионов) совершает периодические колебания. Характерный временной масштаб коллективных движений по порядку величины согласуется с ленгмюровской частотой. Однако в точности они не совпадают: частота обнаруженных колебаний в 1.5–2 раза меньше ленгмюровской частоты. При этом центры масс свободных электронов и квазисвязанных электронов с энергией $\varepsilon < 1.5\gamma T_\varepsilon$ колеблются в противофазе, так что вклад колебаний свободных электронов в дипольный момент в значительной мере компенсируется обратным движением квазисвязанных электронов.

Результаты расчетов временных корреляторов показывают, что они также имеют периодический характер и их период совпадает с периодом колебаний полного дипольного момента системы. Взаимные корреляторы разных проекций дипольного момента так же периодичны, как и автокорреляционные функции, причем периодичность взаимных корреляторов имеет даже более четкий характер.

Полученные спектры корреляторов также демонстрируют тот факт, что имеют место коллективные колебания с частотой, несколько меньшей ленгмюровской.

5. Исходя из изложенного выше, можно высказать предположение, что уменьшение частоты колебаний по сравнению с ленгмюровской обусловлено бесстолкновительным затуханием, которое имеет место при взаимодействии колебаний электронов квазиконтинуума, совершающих движение по кеплеровским орбитам с радиусом порядка межчастичного расстояния и коллективных колебаний свободных электронов плазмы. Это позволяет высказать гипотезу, что обнаруженная ранее метастабильность системы классических кулоновских частиц относительно рекомбинации обусловлена взаимодействием электронов квазиконтинуума с коллективными колебаниями свободных электронов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-02-16872).

Список литературы

- [1] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // УФН. 1994. Т. 164. № 3. С. 298–307.
- [2] Mayorov S.A., Tkachev A.N., Yakovlenko S.I. // Phys. Scripta. 1994. Vol. 51. P. 498–516.
- [3] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. Вып. 23. С. 33–37.
- [4] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Математическое моделирование. 1992. № 7. С. 3–30.
- [5] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Изв. вузов. Физика. 1992. Т. 35. № 11. С. 76–88.
- [6] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Изв. вузов. Физика. 1991. Т. 34. № 11. С. 3–34.
- [7] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Изв. вузов. Физика. 1992. Т. 35. № 2. С. 10–23.
- [8] Неравновесная плазма многозарядных ионов. Тр. ИОФАН / Под ред. С.И. Яковленко. М.: Наука, 1992. Т. 46. 142 с.
- [9] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Кр. сообщ. по физике ФИАН СССР. 1987. № 12. С. 33–34.
- [10] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 4. С. 354–359.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [12] Майоров С.А., Яковленко С.И. // Изв. вузов. Физика. 1994. Т. 37. № 11. С. 44–56.
- [13] Шафранов В.Д. Вопросы теории плазмы / Под ред. М.А. Леонтовича. М.: Госатомиздат, 1963. Вып. 3. С. 3–140.
- [14] Кадомцев Б.Б. Коллективные явления в плазме. М.: Наука, 1976. 286 с.