

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проект РФФИ # 08-02-01328а

Термодинамические и кинетические свойства неидеального ридберговского вещества

Э. А. Маныкин^{+∇}, Б. Б. Зеленер^{*∇}, Б. В. Зеленер^{*}

⁺ Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^{*} Объединенный институт высоких температур РАН, 127412 Москва, Россия

[∇] Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409, Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 сентября 2010 г.

Обзор теоретических исследований, посвященных изучению свойств ридберговского вещества, а точнее, одной из его форм – неидеальной ультрахолодной плазмы. Методами Монте-Карло и молекулярной динамики показана возможность образования структуры как с ближним, так и с дальним порядком и уменьшение величины коэффициента рекомбинации в условиях сильной неидеальности на несколько порядков по сравнению с идеальными условиями. В обзоре приводится обсуждение этих и других результатов, полученных в течение последних нескольких лет.

Введение

В последние годы большое внимание уделяется изучению конденсированных состояний, возникающих в достаточно разреженных газовых системах. К ним, например, относятся многочисленные эксперименты и теоретические работы по охлаждению лазерным излучением разреженных газов с последующим захватом в магнитные ловушки. Это так называемая проблема бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК) в газах [1–3].

В то же время, по-прежнему остается актуальной проблема образования кластеров в газах. Это касается атомов и молекул, находящихся как в основном состоянии, так и в возбужденных состояниях, в том числе ридберговских состояниях, когда главное квантовое число $n \gg 1$ [4–11]. Иногда такую систему называют ридберговским веществом.

Также интенсивно изучается неидеальная неравновесная плазма, полученная при сверхнизких температурах. Эксперименты в этой области проводятся на тех же установках, что и при исследовании БЭК.

Неупорядоченные равновесные системы многих частиц, в которых потенциальная энергия взаимодействия сравнима или больше кинетической, относятся к сильнонеидеальным системам.

В зависимости от рассматриваемого состояния и состава вещества, а также плотности и температуры,

неидеальность может быть обусловлена различными видами взаимодействия: взаимодействием нейтральных частиц между собой в плотном газе и жидкости, взаимодействием зарядов и нейтральных частиц друг с другом, а также между собой в плотной плазме. Кроме того, от области параметров зависит, насколько существенны во взаимодействии квантовые эффекты, обусловленные неопределенностью координат частиц в области порядка тепловой длины волны де-Бройля λ и возможностью образования связанных состояний.

Ридберговское вещество

Понятие ридберговского вещества и возможность фазового перехода в системе возбужденных центров с образованием конденсированных возбужденных состояний было предложено в работах [4, 5], где рассматривался газ электронов и ионов такой плотности, когда электроны вырождены, а температура равна или очень близка к нулю. Конденсированные возбужденные состояния применялись для описания плотных систем возбужденных центров – атомов, молекул, примесей в твердых телах [4, 12]. Примером конденсированных возбужденных состояний может служить хорошо известное электронно-дырочное состояние, возникающее вследствие конденсации экситонов – элементарных возбуждений полупроводников

[4, 13, 14]. Также исследовалась возможность нового механизма воздействия электромагнитного излучения на прозрачные вещества, связанного с одновременным возбуждением большого числа примесных центров [15].

Конденсированные возбужденные состояния представляют собой качественно другое состояние в системе возбужденных центров, отличающееся от исходной системы возбужденных центров настолько, насколько отличается конденсированное состояние вещества от системы атомов или молекул. Как и в случае привычного конденсированного вещества, взаимодействие между центрами при увеличении их плотности приводит, в конечном счете, к изменению фазового состояния системы и качественного изменения всех характеристик.

Экспериментальные исследования ридберговского вещества

а. Эксперименты в термоэмиссионных диодах (ТЭД). Эксперименты с использованием ТЭД были проведены группами шведских и российских исследователей. В [8–11] эксперименты проводились в высоковакуумной камере. Источником цезиевых атомов служил стеклянный контейнер с металлическим цезием, температура которого составляла 130–150 °С. Эмиттером возбужденных атомов служила графитовая фольга, подогреваемая до температуры 1300 К. При ударе об эмиттер атомы цезия эффективно возбуждаются, и становится возможной их ионизация электрическими полями с напряженностью всего 200–400 В/см. Потоки возбужденных атомов цезия от эмиттера могут быть до 10^{15} см⁻² · с⁻¹. Поток возбужденных атомов исследовался с помощью времяпролетного масспектрометра. В спектрах времяпролетных сигналов, помимо пиков, соответствующих атомам цезия, зарегистрированы уширенные пики, соответствующие тяжелым кластерам из атомов цезия, масса которых примерно в сорок тысяч раз больше массы атомов цезия. В эксперименте было обнаружено существование низкого омического сопротивления, причем получена оценка удельного сопротивления конденсата от 10^{-3} до 10^{-2} Ом/м. Последнее значение удельного сопротивления наиболее типично. Авторы интерпретируют свои результаты на основе гипотезы образования конденсированных возбужденных состояний в межэлектродном пространстве, полагая при этом, что полученное удельное сопротивление соответствует конденсированному возбужденному состоянию. В экспериментах была получена, что работа выхода меньше 0.7 эВ, а при определенных условиях – менее 0.5 эВ. Тео-

ретические расчеты работы выхода дают 0.6–0.2 эВ для уровней возбуждения ридберговских атомов $n = 12–14$ [16].

Эти эксперименты были повторены группой российских исследователей [17].

б. Эксперименты с лазерным охлаждением в магнито-оптических ловушках. В 1999 г. группой американских исследователей [18] была получена сильнонеидеальная плазма ксенона в уникальных условиях – при ультранизкой температуре, достигнутой с помощью лазерного охлаждения атомов.

Для создания ультрахолодной плазмы несколько миллионов атомов ксенона возбуждались в разряде до метастабильного состояния $6s[3/2]_2$. Это состояние использовалось как основное для первичного охлаждения лазером на переходе с длиной волны 882 нм до состояния $6p[5/2]_3$. Затем атомы накапливались в магнитооптической ловушке и далее охлаждались до 10 мкК с использованием зеемановского метода. Охлажденные атомы ионизовали в течение 10 нс с помощью двухфотонного возбуждения. Разница между фотонной энергией и ионизационным потенциалом ΔE распределялась между электронами и ионами, но из-за значительного отношения масс практически всю энергию получали электроны. Величина $\Delta E/k_B$, где k_B – постоянная Больцмана, варьировалась в пределах 0.1–1000 К с помощью перестройки частоты лазерного излучения. Полученное облако частично ионизированной плазмы (> 10% ионизированных атомов) имело следующие характеристики: температура ионов $T_i = 10$ мкК, кинетическая энергия на электрон $E_e/k_B = 100$ мК и выше и плотность до $2 \cdot 10^9$ см⁻³. Пространственное распределение плотности предполагалось гауссовым со среднеквадратичным радиусом $\sigma = 200$ мкм. Параметр неидеальности электронов γ_e для такой плазмы достигал 23.5 ($\gamma_e = e^2 n_e^{1/3} / T_e$, e , n_e – заряд и плотность электронов), то есть потенциальная энергия взаимодействия намного больше кинетической энергии движения частиц. Электроны в плазме не вырождены: $n^{1/3} \lambda_e \ll 1$, где $\lambda_e = \hbar / \sqrt{2m_e T_e}$, \hbar – постоянная Планка, m_e – масса электрона.

После создания облака его размер в течение 1–2 мкс не меняется, а потом начинается разлет плазмы, который длится более 30 мкс. Облако плазмы облучали радиочастотным полем, при определенной частоте поля наблюдался отклик в виде вырванных из плазмы электронов. Считая эту частоту плазменной частотой электронов, авторы рассчитывали зависимость плотности плазмы от времени и из этой зависимости вывели скорость разлета [18–20].

В [19] было получено также распределение ридберговских атомов по уровням энергии в зависимости от времени разлета, которое имело аномальный характер: в период 12–22 мкс количество атомов уменьшается, хотя должно увеличиваться из-за рекомбинации.

В [21] была создана плазма, аналогичная [18–20], в щелочных металлах Rb и Cs путем возбуждения газа холодных атомов ($T_a \sim 10^{-4}$ К) на ридберговский уровень энергии (уровень $n = 36–40$). Эксперимент проводился с использованием лазерного охлаждения. Для получения плазмы в газ добавляли 1% возбужденных атомов при $T \sim 300$ К. Систему исследовали при помощи коротких электрических импульсов, которые вырывали из плазмы слабо связанные электроны.

В данной работе показано, что смесь холодных возбужденных атомов и небольшого числа горячих атомов переходит в холодную плазму. Переходные процессы, которые протекают в этой смеси, представляют, с точки зрения авторов, объект дальнейших исследований. Однако эти эксперименты говорят о том, что плотные системы ридберговских атомов могут переходить в состояния, подобные аморфным металлоподобным структурам.

В недавних работах [22, 23] изучалась ультрахолодная плазма, созданная путем ионизации молекул NO. Охлаждение молекул осуществлялось путем расширения сверхзвукового потока газа через отверстие диаметром 0.5 мм. Поток газа представлял собой поток 10%-ной смеси NO с каким-либо инертным газом (He, Ar, Ne, Kr) с выпускным давлением 5 атм. При прохождении через специальный разделитель, состоящий из трех никелевых решеток, из свободного потока газа формировался молекулярный сверхзвуковой пучок диаметром 1 мм и длиной 2 см. В промежутке между решетками часть молекул NO в этом пучке при помощи (Nd:YAG) перестраиваемого лазера, за счет двухфотонного возбуждения, переводилась в заданное ридберговское состояние. Полученный объем ридберговских молекул далее поступал со скоростью молекулярного пучка в канал с градиентом потенциала электрического поля 60 в/см. Поле ионизовало ридберговское состояние NO и ускоряло электроны, которые попадали на многоканальный детектор. В работе [19] из-за отсутствия прямых измерений сделаны оценки параметров плазмы. На основании этих оценок начальная плотность электронов составляет $n_e^0 = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻³, а начальная температура $T_e \cong 7$ К. При этом параметр неидеальности $\gamma_e = 4$.

В работах [24–31] разрабатывались экспериментальные методы диагностики ультрахолодной плазмы, прежде всего для определения температур электронов и ионов.

В экспериментальных работах [18–31] исследовался газ, состоящий из высоковозбужденных (ридберговских) атомов, электронов и ионов при различных n_e , T_e . Для этих экспериментов характерны сильная неидеальность и отсутствие вырождения электронов. Сильное потенциальное взаимодействие между заряженными частицами, как мы увидим ниже, может способствовать возникновению как ближнего, так и дальнего порядка в такой системе, что дает основание полагать частично ионизованную плазму в этих условиях ридберговским веществом [4–7] при отсутствии вырождения.

В дальнейшем мы основное внимание уделим ультрахолодной плазме, хотя часть полученных результатов, касающихся термодинамических и корреляционных функций, относится к [8–11].

Кинетическая модель ридберговской ультрахолодной плазмы

Основная идея большей части теоретических работ, появившихся сразу после первых экспериментов по ультрахолодной плазме была в том, что рекомбинация, протекающая в плазме сразу после ее образования, приводит к увеличению кинетической энергии электронов. Тем самым она приводит к росту T_e , увеличению энергии ионов и замедлению рекомбинации. Во всех теоретических работах [32–41] использовались физические модели ультрахолодной плазмы, которые рассчитывались при помощи численных методов. При этом при построении моделей использовались различные приближения. Электроны рассматривались как однородный фон. Взаимодействие между ионами описывалось при помощи потенциала Юкавы. Рекомбинация рассчитывалась методом решения системы кинетических уравнений баланса с использованием статистических весов водородных состояний и вероятностей перехода с уровня на уровень за счет столкновения с электроном, справедливых в пределе слабой неидеальности. Описание разлета основывалось на решении уравнений гидродинамики. Все полученные в этих работах результаты в какой-то мере описывают экспериментальные данные в области слабой неидеальности. Отсутствие детальных экспериментальных данных в области сильной неидеальности не дает возможности проверить предложенные физические модели [32–41] в этой области. Вместе с тем, остается неудовлетворенность в упрощенном описании сильного взаимодействия между час-

тицами плазмы, а также процессов рекомбинации в сильно неидеальной плазме. Некоторые эффекты при рекомбинации в сильно неидеальной плазме, которые приводят к ее замедлению, рассматривались в [42, 43].

В наших работах [44–55] мы предложили и рассчитали физические модели ультрахолодной плазмы, максимально учитывающие процессы, происходящие в эксперименте.

Ультрахолодная плазма в эксперименте в начальный момент – это газ холодных свободных электронов с определенной одинаковой начальной кинетической энергией и еще более холодных ионов. При рекомбинации ультрахолодной плазмы за время ее наблюдения $t = 10^{-4}$ с определяющими процессами являются столкновительные, так как заселение верхних атомных уровней, энергия которых меньше или порядка T , определяется исключительно трехчастичным процессом столкновения электрон-электрон-ион. Интенсивность радиационных переходов в этой области энергий мала. При увеличении энергии связи роль радиационных процессов возрастает. В [56] приведено значение энергии E_R , которое делит энергетический спектр на две области: на область $E < E_R$, где доминируют ударные процессы, и область $E > E_R$, где возмущение осуществляется ударными процессами, а тушение радиационными:

$$E_R = [n_e / (4.5 \cdot 10^{13})]^{1/4} \cdot T_e^{-1/8}, \quad (1)$$

где T_e выражено в электрон-вольтах, n_e в см^{-3} .

Разлет плазмы, обусловленный амбиполярной диффузией, начинается через несколько микросекунд после ее образования, причем чем меньше начальная кинетическая энергия электронов, тем позже начинается разлет.

Также необходимо отметить, что главное квантовое число уровней, соответствующих $E = T$ в ультрахолодной плазме, $n > 100$. Этот факт и отсутствие вырождения электронов позволяют использовать классическое описание столкновительной рекомбинации в широкой области изменения γ_e .

Модель плазмы. Нами рассматривалась модель [40–43] двухкомпонентной двухтемпературной водородной плазмы, состоящей из электронов и протонов в состоянии до начала разлета. В этой модели взаимодействие одноименных зарядов осуществляется по закону Кулона, а разноименных зарядов – тоже по закону Кулона, но скорректированному на малых расстояниях таким образом, чтобы при $r < A$ потенциал взаимодействия $\Phi_{ei} = e^2/A$, где A выбиралось равным от a_0 до $10 a_0$ (a_0 – боровский радиус, e – заряд электрона). Расчеты этой модели проводились

методом молекулярной динамики в области начальных температур электронов $T_e^0 = 1 \div 5$ К и плотностей $n_e^0 = 10^8 \div 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Методом Рунге-Кутты 4-го порядка численно решалась система уравнений Ньютона в ячейке с длиной ребра $L = (N/n)^{1/3}$. Число частиц N варьировалось в пределах сотни. Выбор N и зависимость от числа частиц подробно рассматривались в [44, 45]. Также там рассматривалась зависимость результатов расчета от выбора A для потенциала взаимодействия между разноименными зарядами.

Начальные условия. Они задавались следующим образом:

а) при $t = 0$ координаты и скорости частиц задавались с помощью генератора случайных чисел;

б) после расчета полных энергий частиц при $t = 0$ скорости частиц поправлялись таким образом, чтобы полная энергия каждой частицы была больше нуля.

В качестве граничных условий выбирались периодические граничные условия. Расчет проводился в микроканоническом ансамбле.

Молекулярно-динамические расчеты для аналогичной неравновесной кулоновской системы частиц проводились ранее только в работах [57, 58]. Однако расчеты осуществлялись в области температур и плотностей, соответствующих низкотемпературной плазме $T_e^0 = 3000 \div 30000$ К и $n_e^0 = 10^{17} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$. При этом параметр γ_e был меньше 0.2. Осуществить расчеты в условиях низкотемпературной плазмы в области больших γ_e было достаточно сложно, так как при этих плотностях и температурах глубокий потенциал взаимодействия электрон-протон приводит к значительному увеличению времени счета в микроканоническом ансамбле.

В [59] для другой модели кулоновской системы частиц, в которой Φ_{ei} на малых расстояниях равнялся константе, зависящей от температуры, то есть $\Phi_{ei} = CT$, где C выбиралось равным от 5 до 7, также были проведены расчеты методом молекулярной динамики равновесной функции распределения и коэффициента рекомбинации в условиях низкотемпературной плазмы до $\gamma_e = 1.5$. Эта модель, как мы увидим ниже, справедлива до тех пор, пока γ_e существенно меньше C .

Рассчитываемые величины. При изучении нами неравновесной кулоновской системы методом молекулярной динамики [48, 49] в первую очередь определялась температура частиц.

Наиболее быстрым процессом при установлении равновесия в плазме является процесс установления электронной температуры. Воспользовавшись для оценки частотой столкновения для случая слабонеидеальной плазмы ($\gamma_e \ll 1$) [60], можно показать, что

температура электронов устанавливается в условиях ультрахолодной плазмы за время $t_e = 10^{-10} - 10^{-11}$ с.

На рис.1 [44, 45] приведены примеры молекулярно динамического расчета установления максвелловско-

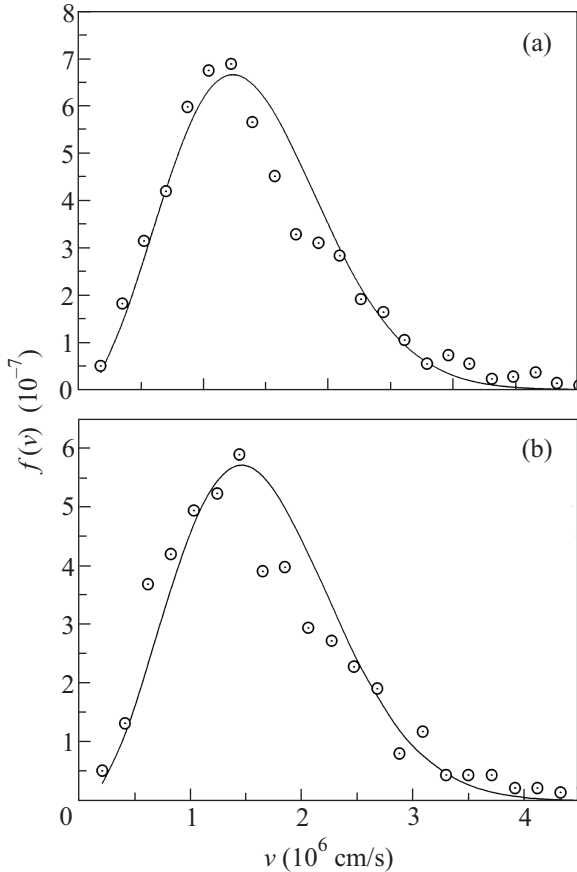


Рис.1. Распределение электронов по скоростям для $n_e^0 = 10^{10}$ см $^{-3}$. Точки – расчет методом молекулярной динамики, кривая – распределение Максвелла для электронов при соответствующей температуре. (а) – момент времени $4.8 \cdot 10^{-9}$ с, $T_e = 5$ К, (б) – момент времени $9.6 \cdot 10^{-9}$ с, $T_e = 7$ К

го распределения кинетической энергии электронов при разных температурах. Одновременно электроны начинают заселять уровни дискретного спектра, то есть начинают идти процессы рекомбинации. Поскольку вначале все электроны находятся в непрерывном спектре, рекомбинация начинается с границы дискретного и непрерывного спектра. При этом в течение долгого времени $t_{\text{РВ}} \sim 10^{-8}$ с $\gg t_e$ формируется квазистационарная неравновесная функция распределения электронов по полной энергии $f(E_i)$, которая вычисляется следующим образом:

$$f(E_i) = \sum_{k=1}^s f_k(E_i) / N_e s \Delta E_i, \quad (2)$$

где ΔE_i – интервал энергии, $f_k(E_i)$ – число частиц с энергией E_i на отрезке времени Δt , N_e – число электронов, s – число временных шагов. Величина $f(E_i)$ нормирована на единицу. Вместе с $f(E_i)$ вычисляется коэффициент диффузии электронов в пространстве энергий:

$$D(E_i) = \frac{\sum (E_i - E_j)^2 \omega(E_i, E_j)}{2 \Delta n_i \Delta t}, \quad (3)$$

где $\omega(E_i, E_j)$ – число переходов из окрестности $E_i \pm \Delta E_i$ в окрестность $E_j \pm \Delta E_j$ за интервал времени Δt , $\Delta n_i = N_e f(E_i) \Delta E_i$ – число электронов в интервале $E_i - \Delta E_i \cdot \frac{E_i + \Delta E_i}{2}$.

На рис.2 приведены рассчитанные функции распределения электронов по энергии $f(E/T)$ для раз-

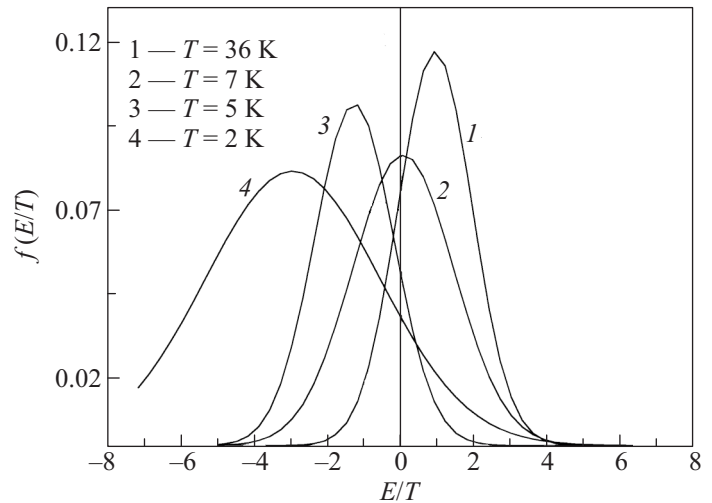


Рис.2. Функции распределения электронов по энергии при различных температурах для $n_e^0 = 10^{10}$ см $^{-3}$ (результаты интерполяции)

личных температур при $n_e^0 = 10^{10}$ см. Приведенные кривые $f(E/T)$ получены путем интерполяции расчетных точек. Все кривые взяты из работ [44–47]. Там же обсуждается погрешность расчета. Необходимо отметить, что в условиях ультрахолодной плазмы равновесная функция распределения электронов отсутствует. В равновесии при этих температурах ультрахолодная плазма – газ атомов в основном состоянии.

Рассмотрим подробнее полученную функцию распределения $f(E/T)$, например, для $T_e = 7$ К ($\gamma_e = 0.5$). На рис.3 представлен график $f(E/T)$, условно разделенный на четыре энергетических зоны: I–IV. Первая зона соответствует свободным электронам и ограничена интервалом $\gamma_e \leq E/T < \infty$. Во второй зоне в интервале энергий $-\gamma_e \leq E/T < \gamma_e$ находятся

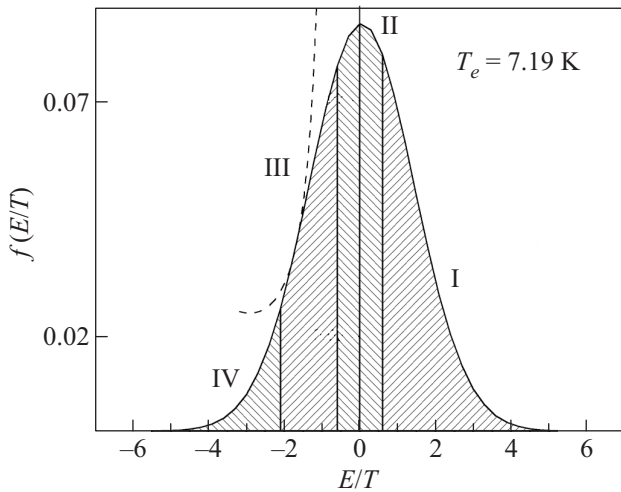


Рис.3. Зоны функции распределения. Зона I – свободные электроны, зона II – квазисвязанные электроны (столкновительные комплексы), зона III – связанные электроны в ридберговских состояниях, зона IV – “рекомбинационный хвост”. Штриховая линия – ионизационное равновесие по уравнению Саха

электроны как бы уже несвободные, но еще не связанные, по терминологии [61, 62], находящиеся в столкновительном комплексе. В третьей зоне в интервале $-\varepsilon_{yг} \leq E/T < -\gamma_e$ находится большая часть электронов в связанных ридберговских состояниях. Значение $\varepsilon_{yг} = E/T$ – это уровень энергии, при котором существует максимальное сопротивление рекомбинационному потоку, так называемое “узкое горло” (см., например, [56]). В случае $\gamma_e \rightarrow 0$ значение $\varepsilon_{yг} = 3/2$ [56]. Эта область $f(E/T)$ характеризуется тем, что функция распределения при данной T_e близка к равновесной водородной функции распределения (штриховая кривая). Тот факт, что в этой области $f(E/T)$ близка к равновесной водородной функции распределения, позволяет определить по формуле Саха эффективную концентрацию свободных электронов, обеспечивающих это равновесие:

$$n_e^* = \left[\frac{n_k(E_k/T_e) e^{-E_k/T_e}}{\lambda_e^3 k^2} \right]^{1/2}, \quad (4)$$

где k – главное квантовое число уровня E_k , $\lambda_e = \hbar/\sqrt{2\pi m T_e}$ – тепловая длина волны де-Бройля, \hbar – постоянная Планка, m – масса электрона.

В таблице представлены значения n_e^* для разных T_e или, что то же самое, для разных γ_e . Также в таблице дана величина интеграла от $f(E/T)$ по $d(E/T)$ от $+\infty$ до нуля, затем до $(-\gamma_e)$, а также определено значение верхнего предела интегрирования \tilde{p} , при котором интеграл совпадает с эффективной концентрацией свободных электронов, полученных по фор-

Эффективная концентрация свободных электронов. Концентрация частиц нормирована на $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$. Температура в градусах К

γ_e	T_e	n_e^*	$p = 0$	$p = -\gamma_e$	\tilde{p}
0.5	7.2	0.24	0.15	0.20	1.13
0.7	5.1	0.19	0.08	0.13	1.44
0.9	4.0	0.15	0.03	0.08	1.47

муле Саха. Анализ результатов таблицы приводит к выводу, что эффективная концентрация свободных электронов определяется совокупностью свободных электронов (зона I) и квазисвободных электронов (зона II). При этом доля электронов, которые являются не связанными и не свободными, траектория движения которых не прямолинейна и не замкнута, растет с увеличением γ_e . К этому также нужно добавить, что квазисвободные электроны (зона II) образуют совокупность энергетических состояний, обусловленных многочастичным взаимодействием. Основной характеристикой квазисвободных электронов является избыточное время пролета области действия сил – время задержки Вигнера [63].

На рис.4 приведены расчетные кривые для коэффициента диффузии в зависимости от T_e (или γ_e)

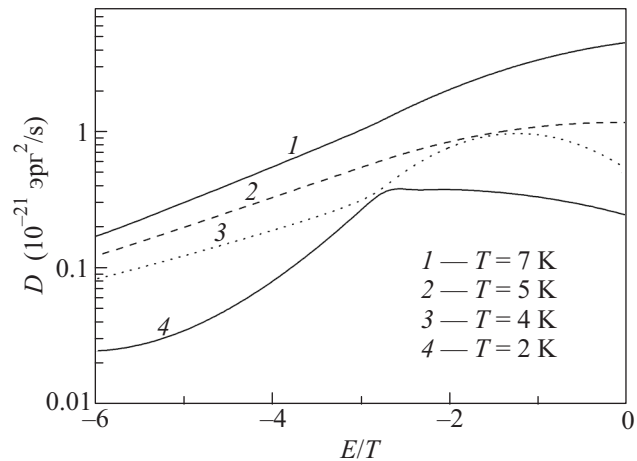


Рис.4. Коэффициенты диффузии электрона в пространстве ридберговских энергий для различных температур при $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ (результаты интерполяции)

для тех же значений, что и для $f(E/T)$. Так же, как и для $f(E/T)$, максимум $D(E/T)$ смещается влево с уменьшением T_e (или с ростом γ_e). В работе [45] была подтверждена возможность использования диффузионного подхода при изучении рекомбинации в ультрахолодной плазме. Было показано, что при столкновениях электронов для разных γ_e переда-

ча энергии в основном осуществляется небольшими порциями, значения которых меньше T_e .

Надо сказать, что методом молекулярной динамики трудно получить достаточную точность функции распределения и коэффициента диффузии в четвертой области $-E_0/T \leq E/T < -\varepsilon_{\text{уг}}$, в области так называемого “рекомбинационного хвоста”. Под “рекомбинационным хвостом” понимается та часть неравновесной функции распределения, которая начинается в конце равновесного участка и продолжается до основного состояния. Этот участок $f(E/T)$, как показывают расчеты, быстро затухает, а число электронов, соответствующее этой части $f(E/T)$ составляет менее 10% от их полного числа. Однако нам удалось, используя результаты, полученные методом молекулярной динамики для эффективной концентрации свободных электронов по формуле (3) и метод кинетических уравнений баланса, надежно рассчитать функцию распределения и коэффициент диффузии в области ридберговских состояний [47]. Этим же методом были рассчитаны потоки ридберговских электронов в неравновесной плазме при заданной плотности для различных температур. Все это позволило рассчитать коэффициент рекомбинации в зависимости от температуры двумя различными способами.

Расчет коэффициента рекомбинации

С одной стороны, можно, используя $f(E/T)$ и $D(E/T)$ для разных значений температур при заданной плотности $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, рассчитать коэффициент рекомбинации по следующей формуле:

$$\alpha = \left[\frac{n_e^0}{\lambda_e^3} \int_0^{E_0/T} \frac{dE/T}{f(E/T)D(E/T)} \right]^{-1}, \quad (5)$$

где E_0 – энергия основного состояния.

С другой стороны, в процессе решения системы кинетических уравнений баланса были определены квазистационарные потоки свободных электронов для ряда температур (см. таблицу). На основании полученных потоков электронов также можно рассчитать коэффициент рекомбинации для начальной концентрации $n_e^0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ при различных температурах по формуле

$$\alpha = \frac{\Delta N_e / \Delta t}{(n_e^*)^3}. \quad (6)$$

На рис.5 в двойном логарифмическом масштабе представлена зависимость коэффициента столкновительной рекомбинации от температуры. Прямая линия,

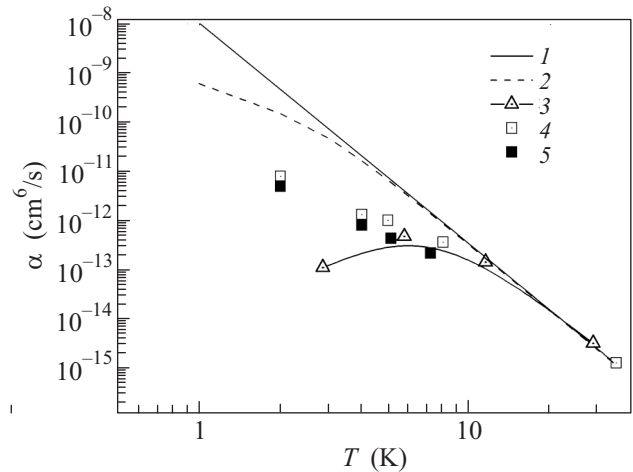


Рис.5. Коэффициент рекомбинации. Линия 1 – результаты расчета по формуле Гуревича–Питаевского [65]. Кривая 2 – результаты расчета в приближении ближайшего соседа [66]. Точки 3 – результаты расчета Ланкина–Нормана [59]. Точки 4 – результаты расчета методом молекулярной динамики [45, 46], точки 5 – результаты расчета методом решения системы кинетических уравнений баланса [47]

так называемый закон “9/2”, соответствует выражению, полученному Гуревичем и Питаевским [64, 65] для идеальной плазмы при $\bar{\Lambda} = 1$, где $\bar{\Lambda}$ – кулоновский логарифм слабосвязанного электрона. Выбор значения $\bar{\Lambda}$ для плазмы при разных γ_e неоднозначен. Поэтому для определенности мы приняли $\bar{\Lambda} = 1$. Кривая 2 описывается формулой, полученной в работе [66] для сильнонеидеальной многократно заряженной плазмы в приближении ближайшего соседа для $\gamma_e \gg 1$. Результаты нашего расчета методом молекулярной динамики по выражению (5) представлены белыми квадратами. Черными квадратами обозначены результаты, полученные по формуле (6) через потоки. Видно, что коэффициенты рекомбинации, рассчитанные обоими способами, хорошо согласуются между собой. Треугольниками на рис.5 представлены результаты расчета из [59] для модели, где $\Phi_{ei} = 5 \cdot T$ на малых расстояниях. Так как эти расчеты приведены в зависимости от γ_e , мы пересчитали их на свои плотность и температуру. В работе [59] коэффициент рекомбинации рассчитывался методом определения количества связанных пар. Об этом подробнее будет сказано ниже.

Анализ приведенных данных показывает, что в области слабой неидеальности для плазмы, когда $\gamma_e < 0.2$, аналитические приближения и результаты численных расчетов совпадают и выполняется закон “9/2”. С уменьшением температуры, что соот-

ветствует росту γ_e , зависимость коэффициента рекомбинации, рассчитанного численно, начинает отличаться от закона “9/2”, причем наши расчеты имеют тенденцию монотонного уменьшения, а результаты [59] в районе $\gamma_e \sim 1$ проходят через максимум. Как показывает проведенный нами анализ, резкое падение коэффициента рекомбинации, полученного в [59], связано с моделью кулоновского взаимодействия разноименных зарядов. Функция распределения электронов в этой модели ограничена со стороны отрицательных энергий значением $C = E/T = -5$. В то же время из рис.2 видно, что для $f(E/T)$ при $\gamma_e \sim 1$ некоторая область значений находится при $E/T < -5$, и с увеличением неидеальности эта область увеличивается. Расчет коэффициента рекомбинации в [59] осуществляется при помощи учета изменения во времени количества классических пар электрон-ион, в которых электрон имеет не меньше четырех набегов фазы. В связи с отсутствием состояний с выбранным набегом фазы в области отсутствия $f(E/T)$ независимо от выбора набега фазы при увеличении γ_e достаточно быстро наступит момент, когда коэффициент рекомбинации обратится в нуль. В модели, использованной в [59], возникает, с нашей точки зрения, дополнительное условие ее применимости, $C \gg \gamma_e$.

В то же время полученная нами зависимость α от температуры не так резко, но отличается от $\alpha_{\text{ГП}}$, причем уже при $T_e \sim 1$ К отличие может достигнуть трех порядков. Это означает, что с уменьшением T_e (или с ростом γ_e) происходит существенное замедление столкновительной рекомбинации по сравнению с экстраполяцией результатов расчетов для слабонеидеальной плазмы в сильнонеидеальную область.

С нашей точки зрения, замедление рекомбинации связано с тем, что с уменьшением температуры (с увеличением неидеальности) растет доля многочастичных состояний с отрицательной энергией (столкновительные комплексы). При этом скорость рекомбинационного потока, в отличие от скорости потока по ридберговским состояниям, становится существенно ниже.

Приведем интерполяционную формулу для описания результатов расчета α . Выражение (6) можно записать в общем виде по аналогии с [63] (при $\bar{\Lambda} = 1$):

$$\alpha = a \frac{[1 - \exp(-b\gamma_e^3)]^{5/6}}{\gamma_e^{5/2}} \alpha_{\text{ГП}}. \quad (7)$$

Найдем a и b , воспользовавшись расчетным значением α при $\gamma_e = 1$ и тем, что при $\gamma_e \rightarrow 0$ $\alpha = \alpha_{\text{ГП}}$. В результате получим: $a = 0.045$, $b = 41.3$.

В случае $\gamma_e > 0.5$ выражение (7) можно упростить:

$$\alpha = 0.045 \frac{\alpha_{\text{ГП}}}{\gamma_e^{5/2}}. \quad (8)$$

Отсюда следует, что при $\gamma_e > 0.5$ коэффициент рекомбинации $\alpha \sim T_e^{-2}$.

В наших работах [48–50] было показано, что возможен еще один механизм замедления перехода электронов в основное состояние. Этот механизм связан с определением вероятности тушения возбужденных атомов медленными электронами, когда энергия перехода ΔE больше энергии налетающего электрона E_e . Дело в том, что все имеющиеся теоретические приближения не описывают вероятность тушения для этого случая. Более того, полуэмпирические выражения также являются неверными, так как получаются из другой области температур при $T > 300$ К.

Кинетика электронных переходов при взаимодействии ридберговских атомов с медленными электронами

В [50] нами был предложен способ получения констант перехода для малых энергий налетающего электрона, который заключается в следующем. Сечение возбуждения связанного состояния вблизи порога можно записать в следующем виде:

$$\sigma_{if} = C \sqrt{E - E_{if}}, \quad (9)$$

где C – константа, не зависящая от энергии налетающего электрона, а E_{if} – пороговая энергия возбуждения состояния f из состояния i . Затем, пользуясь соотношением детального баланса для сечений возбуждения и тушения,

$$\sigma_{if}(E_i) = \frac{g_f E_f}{g_i E_i} \sigma_{if}(E_f), \quad (10)$$

и разложив сечение возбуждения в ряд по энергии, в области порога возбуждения для константы скорости тушения при энергии налетающего электрона $E < 2E_{if}$ получим

$$K_{if} = \left\langle \sqrt{\frac{2E}{m}} \sigma_{if} \right\rangle = \frac{g_f}{g_i} \sqrt{\frac{2}{m}} E_{if} \frac{d\sigma_{if}}{d\sqrt{E}} E \rightarrow E_{if}, \quad (11)$$

где g_i и g_f – статистические веса соответствующих уровней, m – масса электрона, а угловые скобки означают максвелловское усреднение по скоростям налетающего электрона. Таким образом, зная сечение ударного возбуждения уровня f из состояния i , мы можем вычислить константу скорости тушения этого состояния на уровень i .

Полученная таким образом константа K_{fi} не зависит от энергии налетающего электрона. Кроме того, видно, что для вычисления константы скорости тушения состояния f в состоянии i нам необходимо знать сечение ударного возбуждения состояния f . Это сечение, во-первых, должно описываться аналитической функцией и не иметь особенности в точке $E = E_{if}$, а, во-вторых, зависимость σ_{if} от энергии налетающего электрона должна иметь корневой характер в области порога в силу (9). Выражение (11) применимо только для S - S -переходов, однако при рассматриваемых условиях, доля переходов в состояния с большими орбитальными моментами пренебрежимо мала [67].

Выбор сечения возбуждения ридберговского атома. В работе [68] было показано, что полуэмпирические сечения возбуждения водородоподобного атома

$$\sigma_{if} = \frac{2\pi a_0^2 Ry}{E + \gamma_{if}} \left(A_{if} \ln \left(\frac{E}{2Ry} + \delta_{if} \right) + B_{if} \right), \quad (12)$$

где

$$\delta_{if} = \exp \left(-\frac{B_{if}}{A_{if}} \right) - 0.4 \frac{E_{if}}{Ry}, \quad (13)$$

$$\gamma_{if} = Ry \left(8 + 23 \left(\frac{s}{i} \right)^2 \right) \times \left(8 + 11fs + \frac{0.8}{s^2} + 0.4 \frac{f^{1.5}}{s^{0.5}} |s-1| \right)^{-1}, \quad (14)$$

удовлетворяют всем необходимым условиям, сформулированным выше. Они также хорошо согласуются с существующими экспериментальными и расчетными данными для сечений столкновения возбужденных атомов с электронами [50].

Выбор сечений, описываемых выражениями (12)–(14), обусловлен также и тем, что их использование для расчета констант скоростей переходов в области температур, где имеются экспериментальные данные, приводит к хорошему согласию с экспериментом.

Константы скорости тушения и расщепления в зависимости от главного квантового числа. В результате подстановки (12)–(14) в (11) было получено следующее выражение:

$$K_{fi} = \frac{4\sqrt{2}a_0\pi f^2}{(E_{if} + \gamma_{if})i^2\sqrt{m}} E_{if}^{1.5} \times \left(\frac{A_{if}}{\frac{E_{if}}{Ry} + 2\delta_{if}} - \frac{Ry (B_{if} + A_{if} \left[\frac{E_{if}}{2Ry} + \delta_{if} \right])}{E_{if} + \gamma_{if}} \right). \quad (15)$$

Отметим, что формула (11) справедлива в области энергий $E - E_{if} \ll E_{if}$ [69]. Очевидно, что этим же условием ограничивается область применения константы скорости (15). Перепишем это условие в виде

$$E \ll 2E_{if}. \quad (16)$$

На рис.6 приведены константы скорости тушения на ближний уровень в зависимости от главного кван-

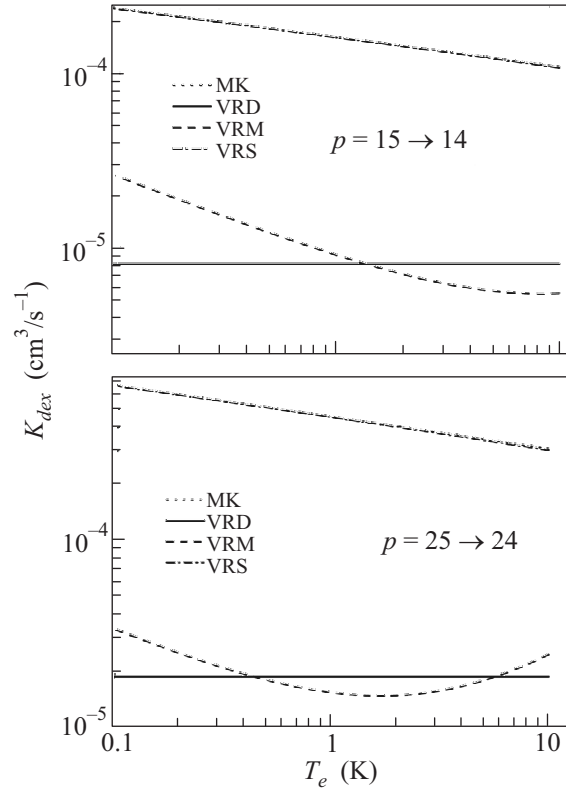


Рис.6. Константы тушения для различных переходов в зависимости от температуры. (а) $p = 15 \rightarrow 14$, (б) $p = 25 \rightarrow 24$; MK – расчет по [70], штриховая линия (VRM) – расчет по [68], сплошная линия (VRD) – расчет по формуле (15), штрих-пунктирная линия (VRS) – расчет по данным работы [71]

тогового числа в области температур $T = 0.1$ – 10 К, рассчитанные с помощью различных приближений. Выбор номера уровня обусловлен условием (16). На рис.6 видно, что в области $T < 10$ К значения всех обсуждаемых выражений для K_{if} , кроме (15), с уменьшением T начинают возрастать. Это противоречит (11), так как при $E \rightarrow 0$ K_{fi} должна быть константой. Необходимо отметить, что результаты [70, 71] в этой области температур совпадают и на порядок отличаются от (15). Видно также, что результаты [68] близки к нашим расчетам по формуле (15), но тоже растут с уменьшением T .

На рис.7 представлен наш расчет константы скорости расщепления с помощью различных приближе-

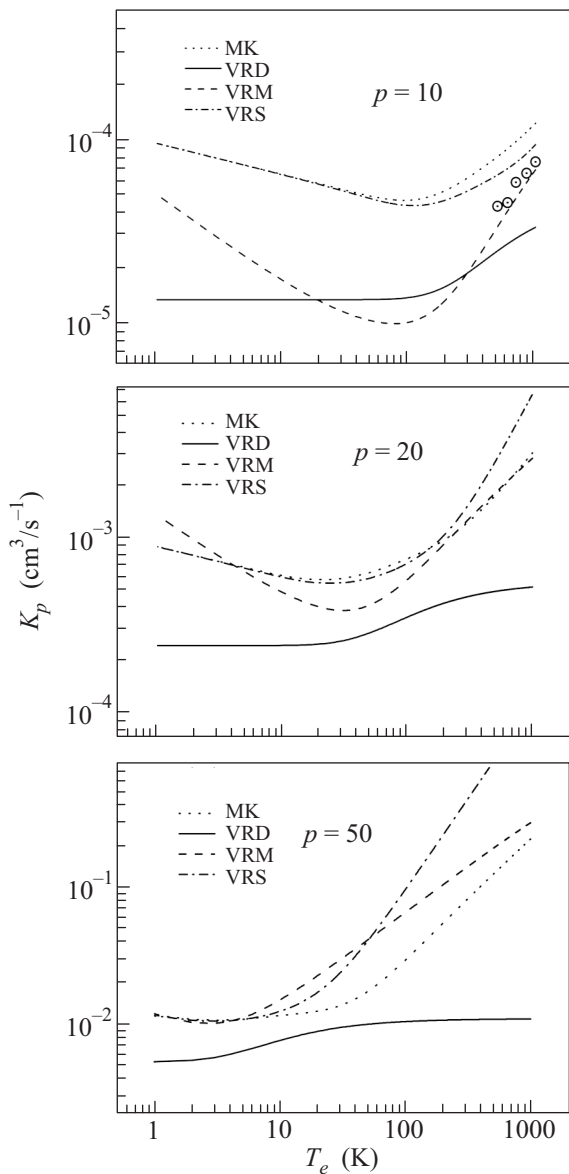


Рис.7. Зависимость константы расщепления уровня p от температуры электронов. Обозначения те же, что и на рис.6. Кружками отмечены экспериментальные данные

ний для различных уровней в зависимости от температуры налетающего электрона в области, где справедливо неравенство (16). Видно, что использование выражения (15) приводит к тому, что константа скорости расщепления, как и константа скорости тушения, действительно не зависят от энергии налетающего электрона в области низких температур. Причем при росте главного квантового числа граница сдвигается в сторону более низких температур.

Это связано с тем, что она определяется в основном константами скоростей тушения, так как процессы возбуждения при энергии электрона, много меньше энергии перехода, не реализуются. Область же, где скорость расщепления перестает быть постоянной, соответствует области энергии налетающего электрона, где нарушается условие (16).

На рис.7 приведены экспериментальные точки [72, 73]. Видно, что поведение экспериментальных данных при экстраполяции в область низких температур, как и следовало ожидать, близко к результатам расчета по выражениям из [68], полученным на основе этого эксперимента. С ростом главного квантового числа (см. рис.7b,c) расчеты по различным моделям начинают сближаться, и для $p = 50$ практически совпадают.

На рис.8 приведены зависимости суммарной заселенности возбужденных атомов с главным кванто-

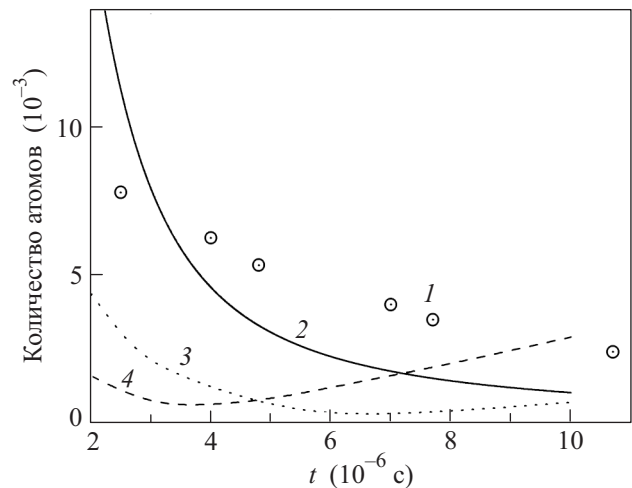


Рис.8. Зависимость полного числа атомов от времени: точки 1 – экспериментальные данные для начальных условий $n_e = 2.7 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 6 \text{ К}$; кривая 2 – расчет с использованием скорректированных вероятностей ударных переходов между связанными состояниями [50]. Кривые 3 и 4 – результаты расчета с учетом [42] и без учета влияния ионных микрополей, соответственно [41, 43]

вым числом от $n_1 = 40$ до $n_2 = 100$: экспериментальные данные [68] и расчеты в различных моделях [37–39, 50]. Как видно, наш расчет [50] в отличие от других работ хорошо описывает экспериментальные данные. К сожалению, экспериментальные данные были получены только для одной точки и то в области слабой неидеальности. При этом главное квантовое число, при котором энергия перехода на ближайший уровень больше энергии налетающего электрона, соответствует $n = 35$. С уменьшением температуры

эта граница сдвигается в сторону больших n . Так для $T_e^0 = 1$ К, $n = 68$. Значительное снижение вероятности тушения на нижние уровни во время рекомбинации приводит к увеличению концентрации высоковозбужденных состояний ниже “узкого горла”. При уменьшении температуры возможно влияние этого механизма на концентрацию возбужденных состояний и выше границы “узкого горла”.

В связи с вышесказанным становится интересной оценка области параметров ультрахолодной плазмы, где частота трехчастичных столкновений, приводящих к рекомбинации, много меньше частоты парных столкновений с передачей импульса. Оценка на основании выражений для слабонеидеальной плазмы (см., например, [59]) приводит к следующему соотношению:

$$\gamma_e^3 \ll 5.7 \frac{L}{\bar{\Lambda}} \xi, \quad (17)$$

где $\xi = \alpha_{ГП}/\alpha$, L – кулоновский логарифм (см., например, [60]). Если положить, что $L = \bar{\Lambda} = 1$, то при $\xi \sim 1$ $\gamma_e^3 \ll 5.7$ или $\gamma_e < 1$. Однако, когда $\xi \geq 10^3$, область параметров, где этот эффект наблюдается, перемещается в область $\gamma_e \geq 1$. Для ультрахолодной плазмы это соответствует, например, области температур 1–10 К и $n_e = 10^9 \div 10^{12}$ см $^{-3}$. Причем плазма в этих условиях невырождена.

Интерес представляет также оценка области параметров, где время термализации ультрахолодной плазмы много меньше времени рекомбинации. Это возможно, когда

$$\gamma_e^3 \ll 5.7 \frac{L}{\bar{\Lambda}} \frac{m}{M} \xi, \quad (18)$$

где M – масса иона.

В случае, если $L = \bar{\Lambda} = 1$, $\xi \geq 10^3$, а $m/M = 10^{-4}$, то это условие выполняется для $\gamma_e \sim 1$. В ультрахолодной плазме легких атомов при $\gamma_e \sim 1$ можно, по-видимому, наблюдать этот эффект.

В работах [51–55] в предположении замедления рекомбинации и отсутствия связанных состояний в этой области параметров были рассчитаны термодинамические и корреляционные функции.

Термодинамическая модель невырожденного ридберговского вещества

Для определения термодинамических и корреляционных функций частичноионизованного ридберговского вещества нами использовалась модификация псевдопотенциальной модели системы частиц с кулоновским взаимодействием, разработанная ранее для низкотемпературной плазмы [74]. Расчет этой

модели проводился методом Монте-Карло [75]. Рассмотрим подробнее расчетную модель и полученные результаты.

Псевдопотенциальная модель и границы ее применимости. Термодинамика равновесной квантовомеханической системы полностью определена, если известна статистическая сумма:

$$Z_N = \text{Sp}(\exp(-\beta \hat{H})) = \int_{V^N} \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n) d^N q, \quad (19)$$

где $\text{Sp}(e^{-\beta \hat{H}})$ – шпур матрицы плотности $\exp(-\beta \hat{H})$, $\Psi_n(q_N)$ и E_n – волновые функции и уровни энергии N частиц, \hat{H} – гамильтониан системы N частиц, q_N – координаты N частиц, V – объем системы, $\beta = 1/T$.

В работах [76–81] был развит подход, позволяющий описать термодинамические свойства неидеальной плазмы в широком диапазоне параметров неидеальности и вырождения, включая область сильной неидеальности и вырождения. Однако для невырожденной плазмы можно воспользоваться более простым подходом, развитым в [74, 81–83], где была предложена псевдопотенциальная модель для расчета статистической суммы неидеальной невырожденной плазмы. Она связана с рассмотрением суммы Слэтера:

$$S_N = N! \lambda^{3N} \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n). \quad (20)$$

Суть псевдопотенциальной модели заключается в том, что (20) представляется в виде произведения парных электрон-электронных, ион-ионных и электрон-ионных слэтеровских сумм:

$$S_{N_e+N_i} = \prod_{i<j=1}^{2N} S_{ij} = \prod_{i<j=1}^{N_e} S_{ee} \times \prod_{i<j=1}^{N_i} S_{ii} \times \prod_{i<j=1}^{N=N_i=N_e} S_{ei}. \quad (21)$$

По аналогии с классикой, произведение (21) можно заменить выражением

$$S_{N_i+N_e} = \exp\left(-\beta \sum_{i<j} \Phi_{ij}\right), \quad (22)$$

где $\Phi_{ij} = -T \ln(S_{ij})$ называется псевдопотенциалом.

Парные слэтеровские суммы в случае электрон-ионных, электрон-электронных и ион-ионных взаимодействий могут быть рассчитаны точно. При этом псевдопотенциал на больших расстояниях совпадает с законом Кулона, а на малых конечен и зависит от температуры [74].

Псевдопотенциалы. В случае, когда не реализуются связанные состояния до $n = n_1$, псевдопотенциал

взаимодействия между электроном и ионом определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta\Phi_{ei}(r, T)) &= S_{ei} = \\ &= 8\pi^{3/2}\lambda_{ei}^3 \sum_{E_n=E_{n1}}^{\infty} |\Psi_n(r)|^2 \exp(-\beta E_n), \end{aligned} \quad (23)$$

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

При этом вклад части дискретного спектра от E_1 до 0 вычисляется по известным волновым функциям для атома водорода, а вклад остальной части спектра – либо численно, либо в квазиклассическом приближении [55]. В [55] показано, когда можно пользоваться квазиклассикой.

В псевдопотенциальной модели, которую мы изучали в [51–55], электрон-ионный псевдопотенциал рассчитывался по формуле (23) с учетом только тех энергетических уровней, которые существуют в нерекombинировавшей плазме. Например, в условиях [18–20] существует только непрерывный спектр, а в условиях [21] – непрерывный спектр и дискретный от $k \geq 36$ или $k \geq 39$. Был также рассмотрен случай с учетом дискретных уровней с $k = 10$, что соответствует экспериментальным условиям в ТЭД [8–11].

Электрон-ионный псевдопотенциал существенно отличается от закона Кулона [55]. Причем, при учете только непрерывного спектра псевдопотенциал переходит в закон Кулона на $10^6 a_0$ (a_0 – радиус Бора) [51–55]. Учет уровней дискретного спектра с 36 уровня существенно понижает ион-электронный псевдопотенциал и переход в закон Кулона происходит на тысячах a_0 .

На рис.9 приведены примеры электрон-ионных потенциалов при учете только непрерывного спектра при $T = 0.1, 0.5, 1$ К, а также потенциал Кулона [55]. Электрон-электронный и ион-ионный псевдопотенциалы в условиях достаточно разреженной кулоновской системы можно описывать классическим законом Кулона [51–55].

Метод расчета. При псевдопотенциальном подходе квантовая статистическая сумма приводится к выражению, которое по форме является классическим [74]. Поэтому для определения соответствующих термодинамических величин можно применить все методы, разработанные в статистической термо-

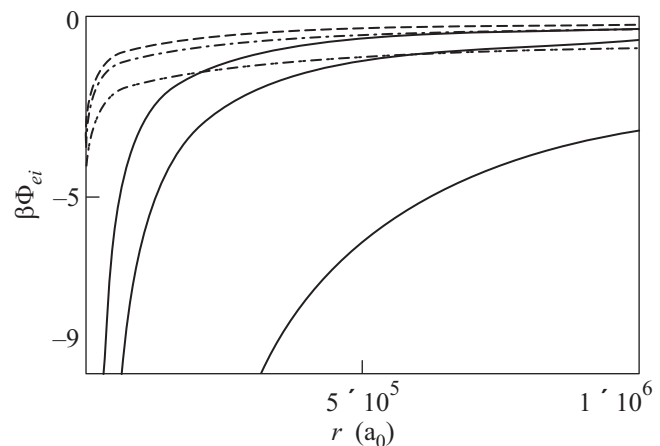


Рис.9. Ион – электронные псевдопотенциалы при температурах: пунктирная линия – $T = 1$ К, штрихпунктир – $T = 0.5$ К, две точки-пунктир – $T = 0.1$ К в сравнении с кулоновскими потенциалами (сплошные линии)

динамике классических систем, как аналитические, так и численные.

Для расчета термодинамических свойств и корреляционных функций ридберговской ультрахолодной плазмы был использован метод Монте-Карло для многокомпонентной плазмы в каноническом ансамбле, развитый в [75]. Определение различных термодинамических величин при этом сводится к вычислению средних значений \bar{F} от известных функций координат q . Например, для энергии

$$\bar{E} = Q^{-1}(N, V, T) \int_V \dots \int E_N(q) S_N(a, T) d^N q, \quad (24)$$

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

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

Погрешности результатов, полученных методом Монте-Карло [75], связаны с выбором числа частиц в ячейке и конечностью длины цепи Маркова. Для оценки погрешности выбора числа частиц были проделаны расчеты для различных $N = 16, 32, 64, 128$ и показана сходимость $\sim N^{-1/2}$. Оценка статисти-

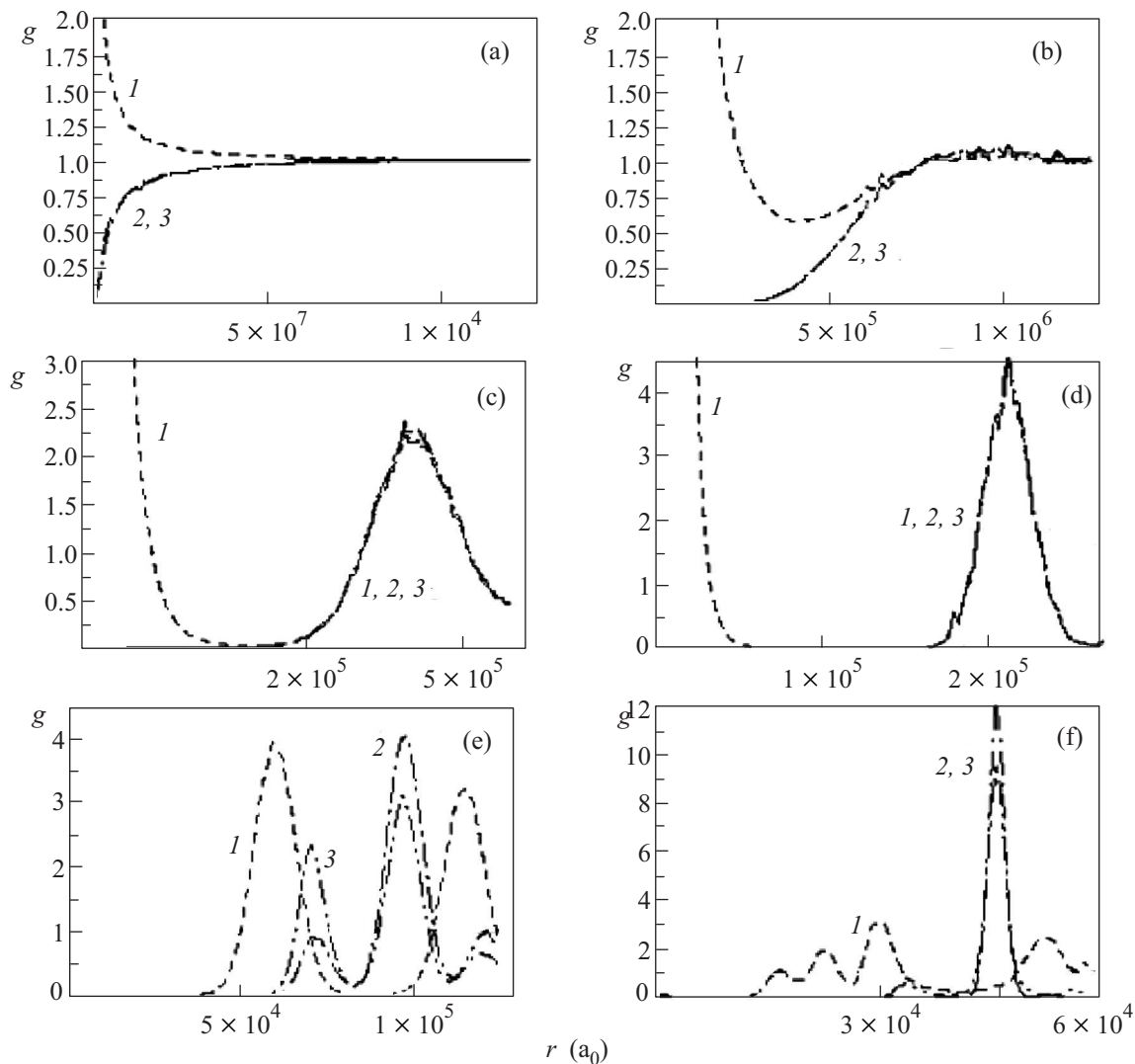


Рис.10. Графики корреляционных функций при различных плотностях и температуре $T = 0.1$ К: 1 - $g_{ei}(r)$, 2 - $g_{ee}(r)$, 3 - $g_{ii}(r)$; (a) - $n = 10$, $\gamma = 0.036$; (b) - $n = 10^7$, $\gamma = 3.6$; (c) - $n = 10^8$, $\gamma = 7.7$; (d) - $n = 10^9$, $\gamma = 16.7$; (e) - $n = 10^{10}$, $\gamma = 36$; (f) - $n = 10^{11}$, $\gamma = 77$

ческой погрешности, связанной с конечностью длины цепи Маркова [75], позволила выбирать цепи Маркова необходимой длины. Кроме того, выбрасывался неравновесный участок. Проводились также расчеты электрон-электронных $g_{ee}(r)$, ион-ионных $g_{ii}(r)$ и электрон-ионных $g_{ei}(r)$ радиальных корреляционных функций.

Результаты расчетов. Оценки времени термализации и рекомбинации, сделанные выше, позволяют нам использовать псевдопотенциальную модель для изучения квазиравновесных термодинамических параметров таких систем, как возбужденные атомы в ТЭД [8–11], ультрахолодная ридберговская плазма, полученная в работах [18–21], а также других аналогичных систем в широком диапазоне температур, концентраций и уровней возбуждения. При этом

плазма состоит из электронов, однозарядных ионов и атомов в высоковозбужденных состояниях, начиная с определенного уровня возбуждения.

В [51–55] были проделаны расчеты для области температур $T = 0.1–10$ К и области концентраций $n = 10^{-2}–10^{16}$ см $^{-3}$ при учете непрерывного спектра и дискретных уровней, начиная с $n = 100$. Расчеты в области низких концентраций обусловлены необходимостью получить предельный переход при $\gamma_e \ll 1$ к значениям, которые согласуются с приближением Дебая–Хюккеля (см., например, [75]).

В качестве примера на рис.10, 11 приведены корреляционные функции $g_{ee}(r)$, $g_{ii}(r)$, $g_{ei}(r)$ для различных плотностей и температур $T = 0.1$ К и $T = 10$ К, соответственно. В случае $\gamma_e \ll 1$ наблюдается хорошее согласие с приближением Дебая–Хюккеля (лине-

аризованным или нелинеаризованным). При $\gamma_e \geq 1$ корреляционные функции указывают на образование ближнего порядка среди частиц как одного, так и разных знаков. При росте γ_e этот порядок усиливается. Максимумы корреляционных функций растут, а минимумы обращаются в нуль, что связано с формированием строгого порядка в пространственном расположении частиц. В области нулевых значений корреляционных функций частицы практически отсутствуют.

Для того чтобы лучше понять ситуацию, связанную с установлением порядка при росте γ_e , использовалась программа визуализации. Она позволяет увидеть расположение частиц в различных равновесных конфигурациях. На рис.12–14 приведены отдельные равновесные конфигурации для различных T, n .

Обсудим результаты для изотермы $T = 0.1$ К. С увеличением плотности возникает порядок, который соответствует решетке с размером $L = 2.2 \cdot 10^5 a_0$ при 10^9 см^{-3} (рис.10).

В узлах решетки находятся пары электронов и ионов на расстоянии $r = 2.2 \cdot 10^5 a_0$. С увеличением плотности до $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ (рис.10) электроны и ионы, образующие пару, расходятся и образуются две решетки: электронная и ионная. Это говорит, по-видимому, о том, что первоначальная решетка, в узлах которой находились пары, – это две решетки, вложенные друг в друга.

При увеличении температуры формирование упорядоченной структуры смещается в сторону увеличения плотности частиц. Так для $T=10$ К при существенно большей плотности $n = 10^{15}$ устанавливается только лишь ближний порядок в виде электрон-ионных кластеров, как видно из равновесной конфигурации, представленной на рис.11. Эти кластеры

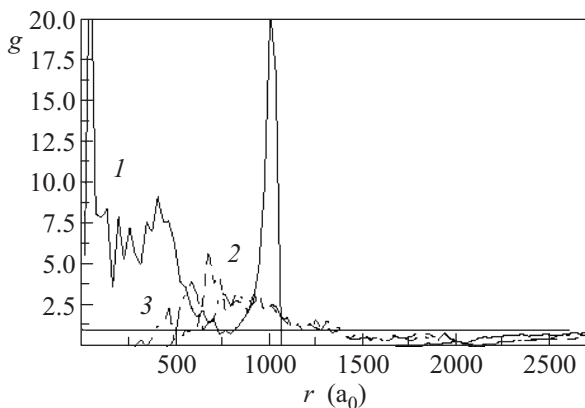


Рис.11. Графики корреляционных функций при плотности $n = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и температуре $T = 10$ К: 1 - $g_{ei}(r)$, 2 - $g_{ee}(r)$, 3 - $g_{ii}(r)$

представляют собой сгустки (капли) разноименно заряженных частиц, причем в этих каплях электроны и ионы выстраиваются в минирешетки.

На рис.12,13 приведены значения внутренней энергии E/NkT на одну частицу и давления P/nkT

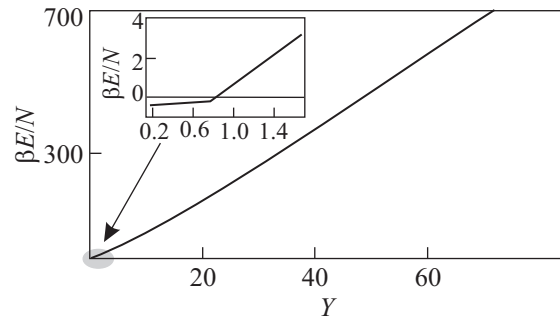


Рис.12. График зависимости внутренней энергии на одну частицу E/NkT от параметра неидеальности γ

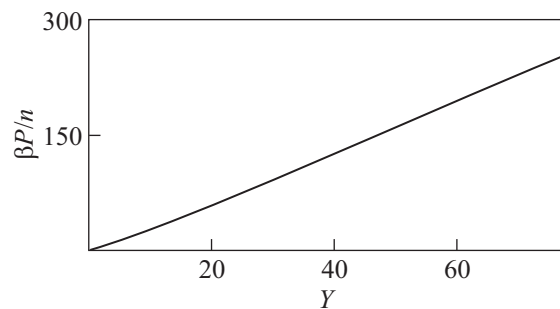


Рис.13. График зависимости давления P/nkT от параметра неидеальности γ

в зависимости от γ_e . В пределе малых γ_e имеется согласие с приближением Дебая–Хюккеля (смотри вставку на рис.12). В области $\gamma < 0.5$ безразмерная энергия E/NkT выходит на дебаевское значение, равное $-\sqrt{\pi}\gamma_e^{3/2}$.

Энергия E/NkT в области $\gamma_e \geq 0.1$ в диапазоне $T = 0.1-10$ К зависит линейно от γ_e (рис.13). Это означает, что, исключив температуру из этой зависимости, получим выражение, аналогичное известному закону Маделунга [51]:

$$E/N = A_1 \cdot e^2 \cdot n^{1/3}, \quad (25)$$

где $A_1 = 10$ – константа (аналог постоянной Маделунга).

Постоянная решетки, как следует из расчетов, $\sim n^{-1/3}$. Формула (25) напоминает выражение для энергии Маделунга для ионного кристалла. Полученные результаты для $E/N = Ae^2 n^{1/3}$ говорят о том, что при $\gamma_e \geq 1$ в полученном ионизованном газе

устанавливается порядок, аналогичный кристаллической решетке, и энергия при этом является функцией среднего расстояния между частицами, которое примерно соответствует постоянной решетки.

На рис.14 приведена n - T -диаграмма. Область параметров, соответствующая дебаевской плазме, обо-

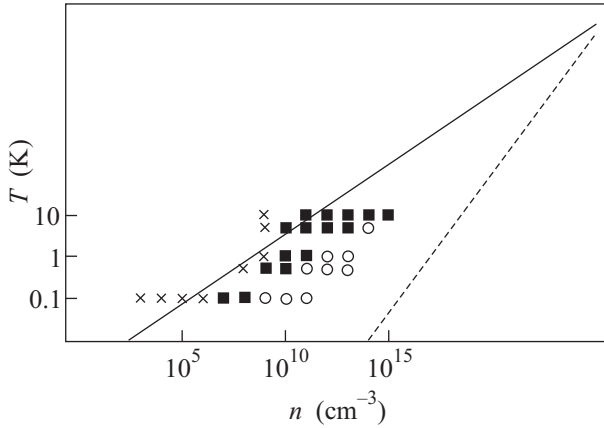


Рис.14. Диаграмма n - T . Крестики соответствуют “газовому” состоянию плазмы, квадраты – “жидкому”, кружки – “твердому” (решетка). Сплошная линия $\gamma = 1$. Пунктирная линия – $n\lambda^3 = 1$

значена крестиками, наличие капель – квадратиками, а появление решетки – кружочками, приведены также линии $\gamma_e = 1$ и $n\lambda^3 = 1$. На диаграмме видно, что формирование ближнего порядка начинается только в области $\gamma_e \approx 1$, и, как было описано выше, при увеличении температуры формирование упорядоченной структуры смещается в сторону увеличения плотности частиц. Кроме того, в данных условиях формирование дальнего порядка возникает задолго до возникновения вырождения.

Полученные результаты также позволяют нам понять то, что происходит при замедленной рекомбинации. В ионизованном газе при $\gamma_e \geq 1$ отсутствуют ридберговские состояния, которые должны рекомбинировать, но существует ближний (а при $\gamma_e \gg 1$ – дальний) порядок для заряженных частиц как одного, так и разных знаков, что снижает вероятность сближения и рекомбинации частиц разных знаков.

Нами были проведены также расчеты для температур $T = 1$ – 100 К и области концентраций $n_i = n_e = 10^5$ – 10^{15} при учете в псевдопотенциале S_{ei} уровней энергии атома с 36 уровня и для $T = 100$ – 1000 К при учете в S_{ei} уровней с $k = 10$ [54]. В случае $\gamma_e \ll 1$, так же, как и в случае учета только непрерывного спектра, наблюдается хорошее согласие корреляционных функций с приближением Дебая–Хюккеля. При $\gamma_e \geq 1$ корреляционные

функции указывают на образование ближнего порядка среди частиц как одного, так и разных знаков. При увеличении γ_e этот порядок усиливается. Максимумы корреляционных функций растут, а минимумы обращаются в нуль.

В отличие от приведенного выше примера, где E/NkT зависит только от γ_e , в данном случае имеет место расслоение результатов расчета по температуре. Для каждой температуры при определенных γ_e есть область отрицательных значений. Причем, чем ниже температура, тем ниже эти значения.

Заключение

Расчеты методом молекулярной динамики модели ультрахолодной плазмы в области сильной неидеальности показали, что коэффициент рекомбинации в этой области на несколько порядков ниже, чем значения, полученные при расчете по выражениям для слабонеидеальной плазмы. Это позволило существенно расширить область параметров, где частота двухчастичных столкновений значительно превышает частоту трехчастичных. В приближении, когда в результате замедления рекомбинации не образуется часть связанных состояний, методом Монте-Карло были рассчитаны термодинамические и корреляционные функции кулоновской системы многих частиц. В результате было обнаружено, что в такой системе, при росте параметра неидеальности, характер структуры меняется от газовой до кристаллоподобной. Причем, в последнем случае параметр решетки равен среднему расстоянию. К сожалению, детальные эксперименты в ультрахолодной плазме были проведены только в слабонеидеальной области параметров. Имеющиеся экспериментальные результаты для сильно неидеальной плазмы не позволяют сделать каких-либо оценок для коэффициента рекомбинации, а тем более для определения структуры. Тем не менее, нам кажется, что продолжение этих экспериментальных работ необходимо для обнаружения новых физических закономерностей.

Работа была поддержана грантом Президента #МК-7883.2006.2, #МК-4872.2008.2, программой РАН академика В.Е.Фортова, грантами Российского фонда фундаментальных исследований #06-02-16845, #08-02-01328а и #10-02-00399а, Федеральным агентством по науке и инновациям (грант #02.740.11.0433), Министерством образования и науки Российской Федерации (ФЦП #П1235, ФЦП 14.740.11.0604).

1. Б. Б. Кадомцев, М. Б. Кадомцев, УФН **167**, 649 (1997).

2. Л. П. Питаевский, УФН **168**, 641 (1998).
3. Л. П. Питаевский, УФН **176**, 345 (2006).
4. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, ДАН СССР **260**, 1096 (1981).
5. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, ЖЭТФ **84**, 442 (1983).
6. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов ЖЭТФ **102**, 804 (1992).
7. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, Химическая физика **18**, 88 (1999).
8. C. Aman, J. V. C. Pettersson, and L. Holmlid, Chem. Phys. **147**, 189 (1990).
9. R. S. Svensson, L. Holmlid, and L. Lundgren, J. Appl. Phys. **70**, 1489 (1991).
10. C. Aman, J. V. C. Pettersson, H. Lindroth, and L. Holmlid, J. Matter Res. **7**, 100 (1992).
11. R. Svenson and L. Holmlid, Phys. Rev. Lett. **83**, 1739 (1999).
12. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, *Электронно-дырочная проводимость в полупроводниках*, М.: Мир, 1980.
13. Л. В. Келдыш, *Экситоны в полупроводниках*, М.: Наука, 1971, с.5.
14. С. Г. Тиходеев, УФН **145**, 3 (1985).
15. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, Поверхность **9**, 110 (1985).
16. L. Holmlid and E. A. Manykin, ЖЭТФ **111**, 1601 (1997).
17. В. И. Ярыгин, В. Н. Сидельников, И. И. Касиков и др., Письма в ЖЭТФ **77**, 330 (2003).
18. T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 4776 (1999).
19. S. Kulin, T. C. Killian, S. D. Bergeson, and S. L. Rolston, Phys. Rev. Lett. **85**, 318 (2000).
20. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 3759 (2001).
21. M. P. Robinson, B. L. Tolra, M. W. Noel et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 4466 (2000).
22. J. P. Morisson, C. J. Rennick, J. S. Keller, and E. R. Grant, Phys. Rev. Lett. **101**, 205005 (2008).
23. J. P. Morisson, C. J. Rennick, and E. R. Grant, Phys. Rev. A **79**, 062706 (2009).
24. J. L. Roberts, C. D. Fertig, M. J. Lim, and S. L. Rolston, Phys. Rev. Lett. **92**, 25 (2004).
25. C. E. Simien, Y. C. Chen, T. C. Killian et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 265003 (2004).
26. E. A. Cummings, J. E. Daily, D. S. Durfee, and S. D. Bergeson, Phys. Rev. Lett. **95**, 235001 (2005).
27. R. S. Fletcher, X. L. Zhang, and R. S. Rolston, Phys. Rev. Lett. **99**, 145001 (2007).
28. P. Gupta, S. Laha, C. E. Simien et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 075005 (2007).
29. J. Castro, H. Gao, and T. C. Killian, Plasma Phys. Control. **50**, 124011 (2008).
30. Y. N. Martinez de Escobar, P. G. Mickelson, P. Pellegrini et al., Phys. Rev. A **78**, 062708 (2008).
31. A. Denning, S. D. Bergeson, and R. Robisheax, Phys. Rev. A **80**, 033415 (2009).
32. M. S. Murillo, Phys. Rev. Lett. **87**, 11 (2001).
33. S. G. Kuzmin and T. M. O'Neil, Phys. Rev. Lett. **88**, 065003 (2002).
34. F. Robicheaux and J. D. Hanson, Phys. Rev. Lett. **88**, 5 (2002).
35. А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, Квантовая электроника **31**, 1084 (2001).
36. S. I. Yakovlenko and A. N. Tkachev, Laser Phys. **11**, 977 (2001).
37. T. Pohl, T. Pattard, and J. M. Rost, Phys. Rev. A. **70**, 033416 (2004).
38. T. Pohl and T. Pattard, J. Phys. A **39**, 4571 (2006).
39. T. Pohl, T. Pattard, and J. M. Rost, Phys. Rev. Lett. **94**, 205003 (2005).
40. А. П. Гаврилюк, И. В. Краснов, Н. Я. Шапарев, Письма в ЖЭТФ **75**, 497 (2002).
41. L. Gao, R. H. Lu, and S. S. Han, Phys. Rev. E **81**, 046406 (2010).
42. Y. Hahn, Phys. Let. E **64**, 046409 (2001).
43. Y. Hahn, Phys. Lett. A **293**, 266 (2002).
44. A. Bobrov, E. A. Manykin, B. V. Zelener, and B. V. Zelener, Laser Physics **17**, 415 (2007).
45. А. А. Бобров, С. Я. Бронин, Б. В. Зеленер и др., ЖЭТФ **134**, 179 (2008).
46. А. А. Бобров, Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер, Д. Р. Хихлуха, XXV Международная конференция "Уравнения состояния вещества", г. Нальчик, тезисы докладов **154**, (2010).
47. А. А. Бобров, С. Я. Бронин, Б. В. Зеленер и др., ЖЭТФ, в печати.
48. S. A. Ivanenko, E. A. Manykin, G. V. Naidis et al., Laser Physics **17**, 419 (2007).
49. Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер, С. А. Иваненко и др., ТВТ **46**, 504 (2008).
50. Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, Д. Р. Хихлуха, Физическое образование в вузах **16**, 2 (2010).
51. Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **99**, 1173 (2004).
52. V. S. Filinov, E. A. Manykin, B. V. Zelener, and B. V. Zelener, Laser Physics **14**, 186 (2004).
53. М. Бониц, Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер и др., ЖЭТФ **125**, 821, (2004).
54. M. A. Butlitsky, V. E. Fortov, E. A. Manykin et al., Laser Physics **15**, 1 (2005).
55. М. А. Бутлицкий, Б. В. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, ЖВММФ **48**, 156 (2008).
56. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, М.: Наука, 1982.

57. С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. Н. Яковленко, УФН **164**, 297 (1994).
58. С. И. Яковленко, Электронный журнал "Исследовано в России" **23**, 304 (2000).
59. A. V. Lankin and G. E. Norman, J. Phys. A **42**, 214032 (2009).
60. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Физическая кинетика, М.: Наука, 1979, стр.207.
61. Е. Р. Wigner, Phys. Rev. **98**, 145 (1955).
62. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, ТМФ **26**, 364 (1976).
63. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, Физика плазмы **3**, 885 (1977).
64. Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **42**, 1326 (1962).
65. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **46**, 1281 (1964).
66. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, ДАН СССР **296**, 577 (1987).
67. V. S. Lebedev and I. L. Beigman, *Physics of Highly Excited Atoms and Ions*, Springer-Verland Berlin, Heidelberg, 1998.
68. L. Vriens and A. H. Smeets, Phys. Rev. A **22**, 940 (1980).
69. Б. М. Смирнов, *Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме*, М.: Атомиздат, 1968.
70. P. Mansbach and J. C. Keck, Phys. Rev. **181**, 275 (1969).
71. T. Pohl, D. Vrinceanu, and H. R. Sadeghpour, Phys. Rev. Lett. **100**, 223201 (2008).
72. J.-F. Delpuch, J. Boulmer, and F. Devos, Le J. De Physique **40**, 215 (1979).
73. J.-F. Delpuch, J. Boulmer, and F. Devos, Phys. Rev. Lett. **39**, 1400 (1977).
74. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике*, М.: Наука, 1981.
75. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, М.: Наука, 1977.
76. В. С. Филинов, В. Е. Фортов, М. Бониц, Письма в ЖЭТФ **72**, 361 (2000).
77. S. Filinov, V. E. Fortov, M. Bonitz, and D. Kremp, Phys. Lett. **274**, 228 (2000).
78. V. S. Filinov, M. Bonitz, W. Ebeling, and V. E. Fortov, Plasma Physics and Controlled Fusion, **43**, 743 (2001).
79. В. С. Филинов, В. Е. Фортов, М. Бониц, П. Р. Левашов, Письма в ЖЭТФ **74**, 422 (2001).
80. V. S. Filinov, W. M. Bonitz, P. Levashov et al., J. Phys. A.: Math. Gen. **36**, 6069 (2003).
81. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, ТВТ **10**, 1160 (1972).
82. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, ТВТ **13**, 712 (1975).
83. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, ТВТ **13**, 913 (1975).