

УДК 533.9

ОБ ЭВОЛЮЦИИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ

С. А. Майоров

Рассматривается временная эволюция кулоновской системы, полная энергия которой в начальный момент времени равна нулю. Методом молекулярной динамики получено решение для системы из 2000 частиц в интервале 8000 обратных плазменных частот. Показано, что в условиях, типичных для экспериментов с ультрахолодной плазмой, показатель неидеальности плазмы не может достигать больших значений из-за рекомбинационного нагрева, а сам процесс релаксации не описывается в рамках традиционной модели трехчастичной рекомбинации.

Ключевые слова: ультрахолодная плазма, показатель неидеальности, связанные состояния, неидеальная кулоновская система, молекулярная динамика.

Введение. В переохлажденной (неидеальной) классической кулоновской системе рекомбинация обусловлена сложным многочастичным взаимодействием, результатом которого является ее резкое замедление. Это явление замедления скорости рекомбинации, как и многие другие процессы, было исследовано методом молекулярной динамики в цикле работ в 1986–1996 гг. (см. [1–5]). Было обнаружено новое состояние кулоновской системы, в которой плазма не рекомбинировала согласно известному закону $9/2$ при низких температурах. Это состояние классической кулоновской системы было названо метастабильной переохлажденной плазмой. В то время в природе не существовало физического объекта, состоящего из классических кулоновских частиц, для которых выполнялось бы условие сильной неидеальности. Поэтому, несмотря на активную дискуссию (см., напр., [6–8]), найденное состояние плазмы так и осталось на уровне вычислительного артефакта.

Но в 1999 г. при селективной ионизации лазером переохлажденных атомов ксенона [9] было получено состояние переохлажденной метастабильной кулоновской плазмы, за

ИОФ РАН, 119991 Россия, Москва ул. Вавилова, 38; e-mail: mayorov_sa@mail.ru + may4536@yandex.ru.

10 лет до этого обнаруженное в численном эксперименте. Первая публикация [9] вызвала большой интерес к свойствам уникального физического объекта, который получил название ультрахолодной плазмы (ultra cold plasma – UCP). После этого был выполнен цикл работ как экспериментаторами, так и теоретиками [10–16], по изучению свойств переохлажденной кулоновской системы. Многие из них переоткрыли заново и подтвердили ряд результатов, полученных на 10–20 лет ранее.

Ультрахолодная нейтральная система классических кулоновских частиц (сгусток плазмы в ловушке), образуемая при селективной ионизации холодных атомов, в процессе релаксации проходит через два этапа. На первом, при незначительном изменении плотности плазмы, происходит формирование метастабильного состояния, в котором имеется баланс между свободными электронами и ридберговскими атомами. Исследование параметров и кинетических характеристик такой плазмы представляет фундаментальный интерес из-за высокой степени неидеальности такой плазмы. На втором этапе эволюции происходит расширение плазменного сгустка в окружающее пространство, дальнейшее переохлаждение и, возможно, плазменный фазовый переход в кристаллическую фазу. Анализ возможности такого перехода представляет собой важнейшую проблему для теории неидеальной плазмы, возможность фазового плазменного перехода обсуждается уже давно. Большая часть экспериментальных работ посвящена релаксации плазмы именно при ее разлете, мы же рассмотрим релаксацию плазмы на первом этапе, который в экспериментальных условиях соответствует временам меньше 1 мкс. На этом этапе плазма релаксирует без изменения плотности, обусловленного расширением. Основным физическим процессом является установление квазистационарного состояния системы.

Постановка задачи и результаты расчетов. Рассмотрена система из одинакового числа $N = 1000$ разноименно заряженных частиц, в начальный момент времени неподвижных и распределенных равномерно внутри счетной ячейки – куба с ребром L и зеркально отражающими стенками. Размеры куба выбирались из условия $nL^3 = N$, где n – числовая плотность ионов, которая задавалась равной $10^{12}/\text{см}^3$. Полагалось, что положительно заряженные частицы (ионы) имеют элементарный заряде и бесконечную массу, т.е. во время расчета они неподвижны. Заряд и масса t электронов выбирались согласно их реальным значениям.

Взаимодействие частиц полагалось равным взаимодействию взаимопроницаемых однородно заряженных сфер диаметром $a = 0.05n^{1/3}$. При плотности ионов $10^{12}/\text{см}^3$ для таких сфер глубина потенциальной ямы составляет $I = 48e^2n^{1/3} = 802$ К, характерная

энергия электронов $e^2/r_{WS} = 27$ К, а при плотности ионов $10^9/\text{см}^3$ глубина потенциальной ямы составляет $I = 80.2$ К, характерная энергия электронов равна $e^2/r_{WS} = 2.7$ К.

Были выполнены расчеты характеристик системы в зависимости от параметра $an^{1/3} = 0.01 - 0.1$, который определяет относительную глубину потенциальной ямы. Зависимость характеристик рассматриваемой системы с нулевой полной энергией от глубины потенциальной ямы оказывается весьма значительной. Но во многих работах на этот фактор не обращается должного внимания, поскольку для проявления этого влияния нужно проводить расчеты большой длительности и высокой точности.

Описанная физическая система из $2N$ кулоновских частиц характеризуется только массой, зарядом, плотностью частиц, а также их диаметром. Выберем в качестве единицы длины радиус сферы Вигнера–Зейтца для частиц одного сорта $r_{WS} = (3/4\pi n)^{1/3}$, единицы времени – обратную плазменную частоту $\tau_0 = \omega_{\text{plasma}}^{-1}$, где $\omega_{\text{plasma}} = (4\pi e^2/m)^{1/2}$, а все энергетические величины будем нормировать на энергию взаимодействия двух частиц с элементарным зарядом на радиусе Вигнера–Зейтца e^2/r_{WS} .

Выбранная физическая система является микроканоническим ансамблем, его безразмерные средние характеристики зависят только от числа частиц в системе и глубины потенциальной ямы в безразмерных единицах $an^{1/3}$. Некоторое влияние, конечно же, оказывает и форма области, но как показывают расчеты, отличие, например, между кубом и шаром при одинаковом числе частиц в них приводит к отличию средних характеристик на величину много меньше 1%. Средние характеристики электронов определяются в результате усреднения по времени, т.е. предполагается равенство средних по ансамблю и времени – гипотеза об эргодичности системы.

Зависимость характеристик системы от числа частиц часто обсуждается, но обычно обращается внимание только на один аспект – на достаточность числа частиц для получения желаемой статистической достоверности. В связи с этим иногда используется прием многократного повторения расчетов с малым числом частиц и различными начальными условиями. Однако в этом случае влияние границы на характеристики системы может быть весьма значительным.

В качестве простого примера рассмотрим влияние числа частиц N на среднее расстояние между частицей и ее ближайшим соседом для системы частиц, случайным образом разбросанных внутри куба. Определим среднее расстояние от электрона до ближайшего иона следующим образом

$$\langle r_{ab} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |r_k - r_{kb}|, \quad (1)$$

где r_k – радиус-вектор выбранного электрона, а r_{kb} – радиус-вектор ближайшего иона, суммирование ведется по всем электронам в системе. Отметим, что среднее расстояние от электрона до ближайшего иона зависит только от плотности ионов и не зависит от плотности электронов.

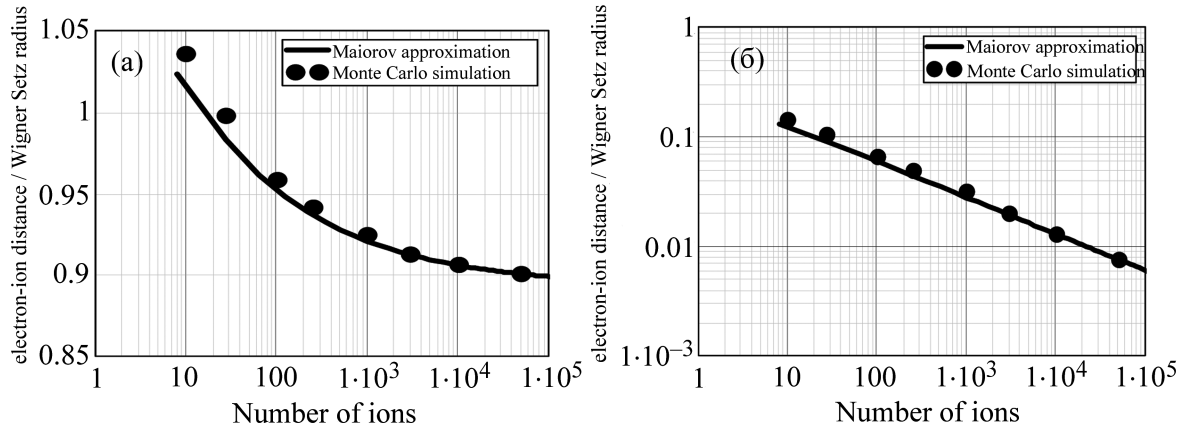


Рис. 1: (а) зависимость среднего расстояния $\langle r_{ab} \rangle$ между электроном и ближайшим ионом в кубе с ребром L от числа частиц; (б) отклонение среднего расстояния $\langle r_{ab} \rangle$ в кубе с ребром L от значения $\langle r_{ab} \rangle_\infty$ для бесконечной системы $\langle r_{ab} \rangle_\infty / r_{WS} = \Gamma(4/3)$.

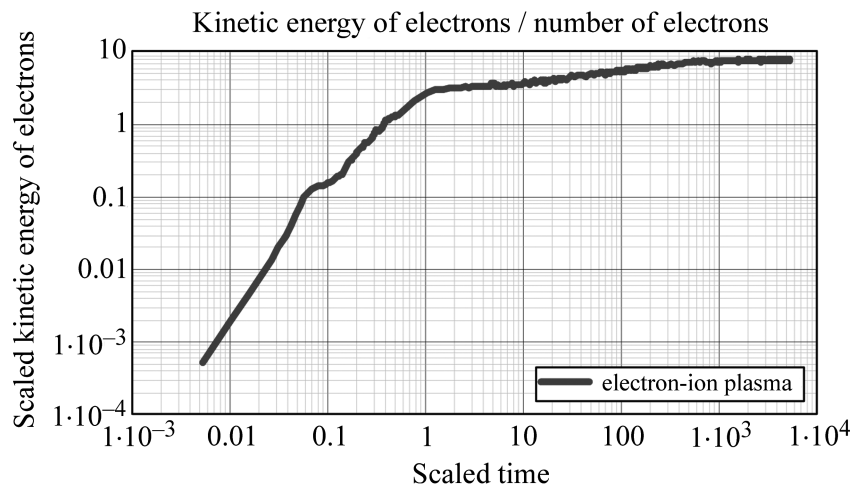


Рис. 2: Расчет зависимости кинетической энергии электронов от времени.

На рис. 1(а) приведена вычисленная методом Монте–Карло зависимость от числа ионов, находящихся в кубе с ребром L , среднего расстояния от электрона до ближайшего иона, нормированная на радиус сферы Вигнера–Зейтца $r_{WS} = (3/4\pi n)^{1/3} \approx 0.62/n^{1/3}$.

На этом же графике приведена аппроксимация

$$\langle r_{ab} \rangle = r_{WS} \Gamma(4/3) [1 - 3r_{\max}/2N^{1/3}]^{-1/3}, \quad (2)$$

полученная из соображений учета влияния понижения эффективной плотности вокруг частиц, находящихся вблизи поверхности. Для оценки толщины поверхностного слоя использовалось значение наиболее вероятного расстояния до ближайшей частицы, и полагалось, что в поверхностном слое эффективная плотность частиц в два раза ниже. Средние расстояния между ближайшими соседями на графиках нормируются, как это принято в большинстве работ по ультрахолодной плазме, на радиус сферы Вигнера–Зейтца.

В некоррелированной бесконечной системе частиц с заданной числовой плотностью вероятность того, что ближайшая частица находится в заданном интервале расстояний $(r, r + \Delta r)$, равна

$$P(r)\Delta r = 4\pi r^2 \exp(-r^3/r_{WS}^3)\Delta r. \quad (3)$$

Это так называемое распределение ближайшего соседа. Максимум этой функции соответствует наиболее вероятному расстоянию до ближайшей частицы $r_{\max} = (2/3)^{1/3}r_{WS}$. Среднее расстояние до ближайшей частицы получается усреднением радиуса по распределению (3) и равно

$$\langle r_{ab} \rangle = \int_0^\infty rP(r)dr = r_{WS}\Gamma(4/3) \approx 0.893r_{WS}. \quad (4)$$

В связи с этим стоит отметить, что для некоррелированной системы частиц радиус сферы Вигнера–Зейтца не является ни средним расстоянием между частицами, ни средним расстоянием до ближайшей частицы, ни наиболее вероятным расстоянием до ближайшей частицы.

На рис. 1(б) приведена в дважды логарифмическом масштабе зависимость отклонения среднего расстояния между ближайшими соседями от его предельного значения (4) для бесконечной системы, показывающая влияние границы на средние расстояния от электрона до ближайшего иона. Видно, что погрешность уменьшается пропорционально $1/N^{1/3}$ и при $N = 1000$ составляет величину порядка 3%.

Для исследования временной эволюции распределенных равновероятно внутри счетной ячейки и неподвижных в начальный момент времени электронов методом молекулярной динамики [1, 2] рассчитывались траектории $N = 1000$ электронов (ионы полагались бесконечно массивными и неподвижными) и строились следующие характеристики электронной подсистемы:

- зависимость кинетической энергии электронов от времени (рис. 2);
- зависимость расстояний между ближайшими соседями (электрон-ионного и электрон-электронного) от времени (рис. 3);
- функции распределения электронов по полной энергии на различных стадиях релаксации системы (рис. 4).

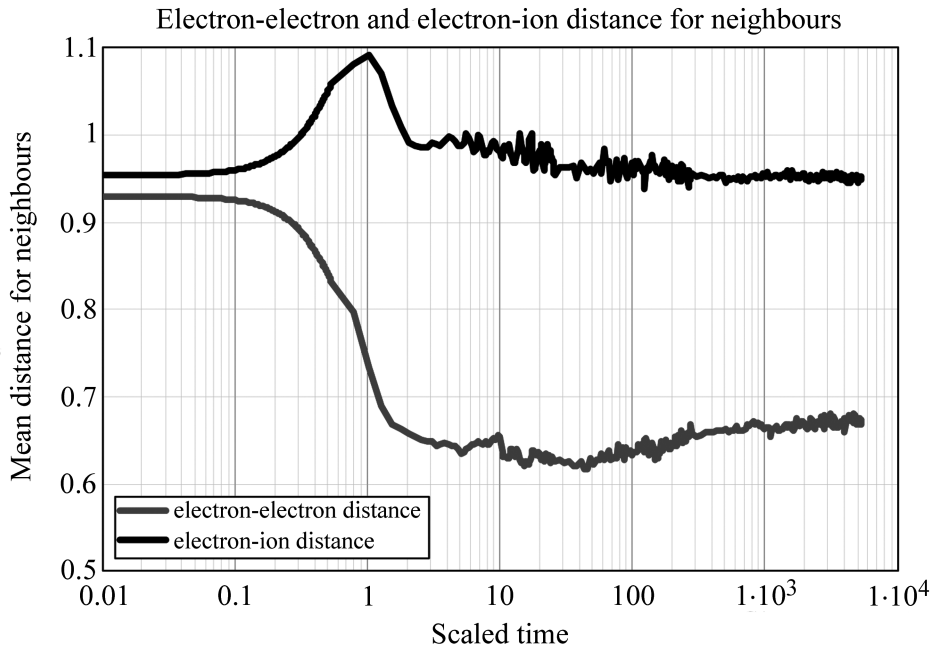


Рис. 3: Зависимость от времени средних расстояний между электроном и ближайшим к нему электроном (верхняя кривая) и ионом (нижняя кривая).

На всех графиках представлены результаты расчетов для потенциальной ямы, соответствующей электрон-ионному притяжению, с глубиной $I = 48e^2n^{1/3}$. С целью исследования влияния глубины потенциальной ямы на характеристики системы были выполнены расчеты для более мелкой (в два раза) и более глубокой потенциальной ямы. Детальное исследование этого вопроса о влиянии глубины ямы будет представлено в отдельной работе. На всех приведенных графиках время $\tau = \omega_{\text{plasma}} t$ измеряется в обратных ленгмюровских (плазменных) частотах $\omega_{\text{plasma}} = (4\pi e^2 n_e / m_e)^{1/2}$, а расстояние между соседями нормируется, как это принято в большинстве работ по ультрахолодной плазме, на радиус сферы Вигнера–Зейтца для частиц одного сорта $r_{WS} = (3/4\pi n_e)^{1/3}$.

Обсуждение результатов моделирования. Поставленная задача может рассматриваться как задача о рекомбинации холодной кулоновской системы. В теории рекомбинации кулоновских частиц скорость рекомбинации иона $R = 1/\tau_{\text{rec}}$ определяет их убыль

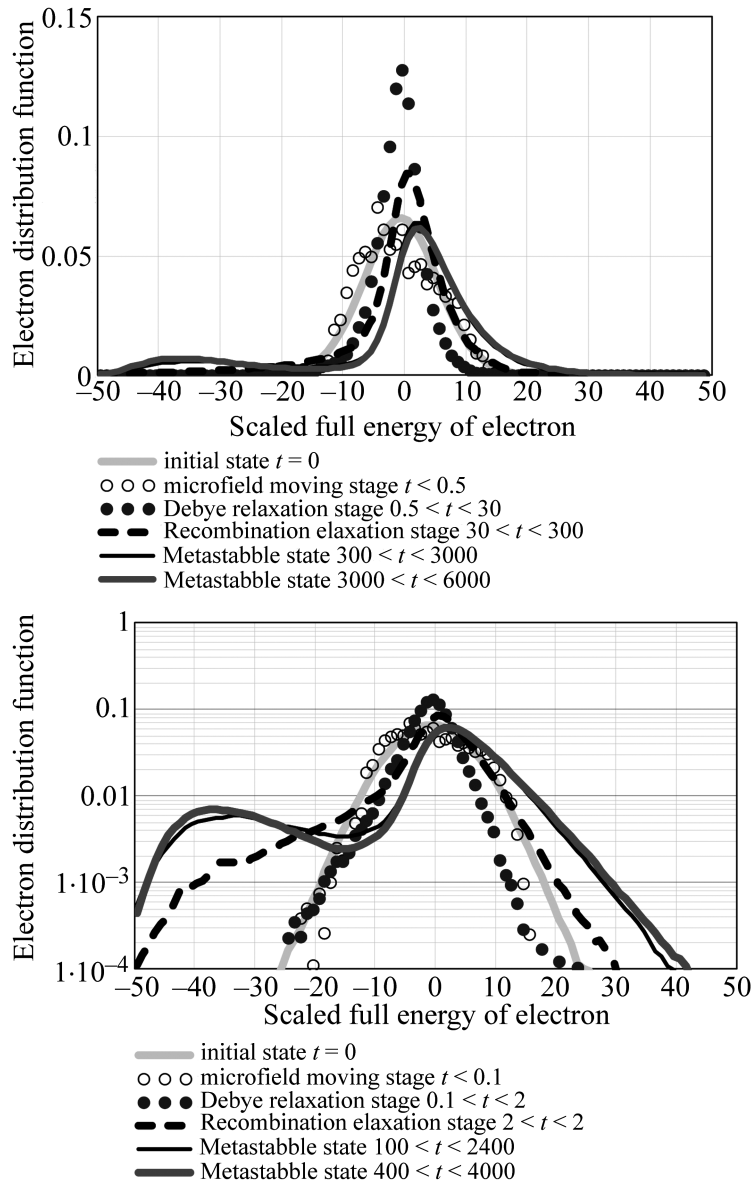


Рис. 4: Функции распределения электронов по полной энергии, вычисленные по различным интервалам времени, в линейном и логарифмическом масштабе.

из-за рекомбинации с электронами

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{\tau_{\text{rec}}} \tag{5}$$

и для нее обычно используется формула Гуревича–Питаевского [1]

$$R = 3.9 \times 10^{-9} \left[\frac{n_e}{\text{cm}^{-3}} \right]^2 \left[\frac{T_e}{\text{K}} \right]^{-9/2} \text{ s}^{-1}. \tag{6}$$

По сути формула (6) является формулой Томсона, которая получена для вероятности столкновения двух электронов в малой окрестности иона, после которого один из них оказывается захваченным на кеплеровскую орбиту. Однако в неидеальной плазме, когда нарушаются условия идеальности

$$\Gamma = \frac{e^3 n^{1/3}}{T_e a_{WS}} \ll 1, \quad (7)$$

где Γ – показатель неидеальности, формула Гуревича–Питаевского неприменима, поскольку нарушается условие парности столкновений. В этом случае взаимодействие большей части электронов носит многочастичный характер, и гипотеза о мгновенности столкновений не выполняется. Соответственно, в переохлажденной классической кулоновской системе с $\Gamma \geq 1$ рекомбинация обусловлена более сложным многочастичным взаимодействием.

Приведенные на рис. 2–4 результаты расчетов демонстрируют основные этапы и особенности эволюции первоначально неупорядоченной кулоновской системы покоящихся частиц. Как показывает анализ представленных на графиках результатов, эволюция кулоновской системы от первоначально некоррелированной происходит несколько характерных стадий.

На первом этапе – назовем его микрополевым, частицы движутся равноускоренно, поле на этом этапе для каждой частицы не меняется. Соответственно, средняя по ансамблю кинетическая энергия электронов

$$K(t) = \frac{1}{2Nm} \sum_{i=1}^N p_i^2(t) \quad (8)$$

имеет квадратичную зависимость от времени, поскольку энергия фиксированного электрона при равноускоренном движении равна:

$$K_i(t) = \frac{1}{2} m (eF_i t / m)^2 \propto t^2. \quad (9)$$

На рис. 2 энергия электронов растет квадратично по времени в интервале $0 < \omega_{\text{plasma}} t < 0.07$, далее в интервале $0.07 < \omega_{\text{plasma}} t < 0.15$, происходит замедление скорости роста. Это замедление обусловлено появлением пространственной корреляции, в первую очередь, парной электрон-электронной корреляции. Далее, в интервале $0.15 < \omega_{\text{plasma}} t < 1$, происходит сильный рост кинетической энергии, в основном, из-за падения электронов на притягивающий заряженный центр. Свой вклад вносят также и электроны, оказавшиеся в начальный момент времени близко друг к другу. Их вклад

в рост кинетической энергии на самом начальном этапе такой же, как и от электронного взаимодействия, а потом он чуть уменьшается, поскольку при разлете сила расталкивания уменьшается. Для взаимодействия электрона с неподвижным ионом ситуация обратная – при падении электрона на центр сила растет, поэтому энергия растет даже несколько быстрее, чем по формуле (9), зато после пролета силового центра кинетическая энергия электрона резко падает.

После равноускоренного движения в постоянном микрополе электроны в течение периода времени $0.15 < \omega_{\text{plasma}} t < 1.3$, проходят расстояние порядка межчастичного, их средняя кинетическая энергия равна $\langle K \rangle \approx 1.8e^2/r_{WS}$. На этом этап быстрой дебаевской релаксации, который равен обратной плазменной частоте, заканчивается и начинается период очень медленной рекомбинационной релаксации, который сопровождается небольшим рекомбинационным разогревом.

После рекомбинационного периода $2 < \omega_{\text{plasma}} t < 500 - 700$ кулоновская система находится в метастабильном (равновесном) состоянии. Детали и особенности этого состояния будут представлены в отдельной работе.

На рис. 3 представлены зависимости от времени средних расстояний между электроном и ближайшим к нему электроном/ионом. В интервале $0.2 < \omega_{\text{plasma}} t < 2$ происходит возникновение и разрушение некоторой упорядоченности в электронной подсистеме, причем пик упорядоченности приходится точно на момент времени $t = 1/\omega_{\text{plasma}}$. За этот же период времени формируются дебаевские корреляции между электронами и ионами. Далее, в интервале $2 < \omega_{\text{plasma}} t < 5000$, средние расстояния между ближайшими частицами (одинаковых и разных знаков) практически не меняются. Это обстоятельство указывает на некоторое равновесие между свободными электронами и связанными. Это метастабильное состояние сопровождается незначительной релаксацией к среднему значению функции распределения электронов по полной энергии.

На рис. 4 представлены функции распределения электронов по полной энергии, усреднение велось по различным интервалам времени. Начальное распределение электронов по полной энергии совпадает с распределением по потенциальной энергии и содержит достаточно много связанных электронов. При дальнейшей эволюции число электронов с отрицательной полной энергией уменьшается. Этим обстоятельством объясняется некоторое увеличение среднего электрон-ионного расстояния в процессе эволюции. Процесс имеет аналогию с образованием свободных электронов из газа ридберговских атомов [12–16].

Заключение. В настоящей работе на основе молекулярно-динамических расчетов исследовалась эволюция ультрахолодной плазмы на начальном этапе, когда образованный после фотоионизации сгусток неподвижных ионов и электронов занимает фиксированный объем. Формирование метастабильного состояния проходит через этап медленного рекомбинационного заполнения связанных ион-электронных состояний. Скорость рекомбинации и характер не соответствуют обычным представлениям о тройной рекомбинации, а обуславливаются более сложным многочастичным взаимодействием.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 8392 от 24 августа 2012 г. “Образование структур и стохастизация в плазме” и РФФИ, проект 14-02-00502.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, Матем. моделирование **4**(7), 3 (1992).
- [2] С. А. Майоров, С. И. Яковленко, Известия ВУЗов, Физика, No. 11, 44 (1994).
- [3] С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, Известия ВУЗов, Физика, No. 11, 3 (1991); No. 2, 10 (1992); No. 11, 76 (1992); No. 1, 68 (1993).
- [4] С. А. Майоров, А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, УФН **164**, 298 (1994).
- [5] S. A. Maiorov, A. N. Tkachev, and S. I. Yakovlenko, Physica Scripta **51**, 498 (1995).
- [6] С. А. Майоров, Краткие сообщения по физике ФИАН, № 5-6, 10 (1997).
- [7] A. M. Ignatov, A. I. Korotchenko, V. P. Makarov, et al., УФН **165**, No. 1, 113 (1995), см. также комментарий к этой статье авторов работы [4].
- [8] С. И. Яковленко, Краткие сообщения по физике ФИАН, № 3, 13 (1999).
- [9] T. C. Killian et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 4776 (1999).
- [10] S. G. Kuzmin and T. M. O’Neil, Phys. Plasmas **9**, 3743 (2002).
- [11] Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **126**, вып. 6(12), 1344 (2004).
- [12] M. S. Murillo, Phys. Plasmas **14**, 055702 (2007).
- [13] L. Guo, R. H. Lu, and S.S. Han, Phys. Rev. E **81**, 046406 (2010).
- [14] S. D. Bergeson, A. Denning, M. Lyon, and F. Robicheaux, Phys. Rev. A **83**, 023409 (2011).
- [15] K. Niffenegger, K. A. Gilmore, and F. Robicheaux, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **44**, 145701 (2011).

- [16] M. Lyon and S.D. Bergeson, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**, 184014 (2011).
- [17] J. P. Morrison, N. Saquet, and E. R. Grant, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **45**, 025701 (2012).

Поступила в редакцию 3 декабря 2013 г.