

УДК 533.95

К ВОПРОСУ О РЕКОМБИНАЦИИ КЛАССИЧЕСКОЙ КУЛОНОВСКОЙ ПЛАЗМЫ НА УПРУГО ОТРАЖАЮЩИХ СТЕНКАХ

С. А. Майоров

Проведен анализ влияния различных граничных условий на рекомбинацию системы классических кулоновских частиц при моделировании из первопринципов. Показано, что упругие граничные условия не оказывают существенного влияния на релаксационные процессы и позволяют проводить изучение объемных свойств плазмы.

Введение. В цикле исследований по моделированию из первопринципов динамики многих кулоновских частиц получены результаты, приводящие к выводу о наличии у такой системы, не подвергающейся воздействию стохастического характера, метастабильного (квазистационарного) состояния (см. обзоры [1-3]). Это состояние отличается от термодинамически равновесного и характеризуется резким спадом функций распределения (ФР) в области отрицательных энергий. Вывод о том, что кулоновская система начинает следовать основным законам статистической механики лишь при наличии стохастизирующего воздействия, инициировал ряд работ [4-8], в которых обсуждаются причины наблюдаемой в вычислительных экспериментах задержки рекомбинации. В работе [8] проведено исследование рекомбинации классической кулоновской плазмы, состоящей из частиц одинаковой массы, на упруго отражающих стенках. Ее авторы придерживаются нашей прежней гипотезы [1-3] об отсутствии рекомбинации в изолированной системе классических кулоновских частиц, не подвергающейся воздействию стохастического характера. В этом случае рекомбинация – образование нескольких связанных пар, впервые замеченная при выполнении более точных и длительных расчетов в работе [3] и значительно замедленная по сравнению с известной скоростью тройной

рекомбинации, неизбежно связывается с внешними причинами – стенками и стохастизирующим влиянием погрешностей разностных схем. Там же нами было проведено исследование влияния стенок и погрешностей на рекомбинацию и высказано предположение о возможности образования связанных пар из-за столкновения со стенкой.

Особое внимание к проблеме влияния граничных условий на результаты моделирования было привлечено после появления работы А. М. Игнатова и др. [4]. В критическом комментарии на эту работу [5] указано на отсутствие какого-либо ясного физического механизма, приводящего к тому, что переохлажденная, рекомбинационно-неравновесная плазма за счет столкновений с упругой стенкой будет преимущественно ионизоваться.

С целью исследования стимуляции рекомбинации за счет столкновений с зеркально отражающими стенками в работе [6] проведен расчет функций распределения (ФР) по полной энергии электронов для разного соотношения масс электронов и ионов. При столкновении с упругой стенкой эффект перераспределения полной энергии связанной пары частиц между ее энергетическими подсистемами – энергией поступательного движения пары как целого и энергией пары в системе ее центра масс, зависит от соотношения масс. Он максимален для плазмы из частиц равных масс и исчезает в случае бесконечно тяжелых (неподвижных) ионов. Рассчитанные ФР электронов по полной энергии показали появление "рекомбинационного хвоста", что было связано с рекомбинационным влиянием упругих стенок на систему классических кулоновских частиц. Однако А. А. Рухадзе в комментарии [7] полагает, что влияние стенок является существенным в формировании метастабильного состояния системы классических кулоновских частиц. И, наконец, в работе [8] замедленная рекомбинация плазмы связывается с влиянием стенок.

Таким образом, по поводу ионизационно-рекомбинационного влияния абсолютно упругих стенок на ограниченную систему классических кулоновских частиц сейчас уже опубликовано шесть работ [3-8], но отсутствует единая точка зрения в оценке их роли. Видимо, стороны исходят из уже сформированной позиции в отношении метастабильного состояния переохлажденной плазмы, полученного при уникальных компьютерных экспериментах и не подтвержденного экспериментально. Авторы работ [3, 5, 6, 8] исходят из того, что система классических кулоновских частиц, не подвергающаяся стохастическому воздействию внешнего характера, рекомбинировать не должна и, следовательно, если все-таки рекомбинирует, то причину следует искать во влиянии стенок и ошибках интегрирования уравнений динамики частиц. Авторы работ [4, 7] исходят из того, что плазма должна рекомбинировать и, следовательно, если не рекомбинирует, то причину надо искать в отличиях ограниченной системы классических кулоновских

частиц от реальной плазмы, т.е. в ионизирующем влиянии стенок и квантовых эффектах.

Анализ предыдущих результатов. Вопрос о влиянии граничных условий при моделировании объемных свойств плазмы методом динамики частиц традиционен, и в ряде случаев найден точный ответ. Получены поправки к распределению мгновенных микрополей, термодинамическим характеристикам (обзор и ссылки см. в [1-3]). Проводились расчеты для изучения влияния на характеристики кулоновской системы различных граничных условий – рассматривались зеркальные, шероховатые, термостабилизирующие, мягкие стенки, периодические граничные условия. Большая часть расчетов проводилась с зеркальными граничными условиями, как наиболее соответствующими физической постановке задачи исследования объемных свойств плазмы.

Полученное в работе [8] различие ФР в расчетах со стенками различной жесткости используется для доказательства наличия интенсивной стеночной рекомбинации. Но стеночное перемешивание имеется и при пологих, и при крутых, и при зеркальных стенках. Его нет при мягких стенках, предложенных в работе [3], при которых пара отражается как целое. Отличие же ФР, видимо, обусловлено разницей в среднеквадратичных значениях плотности при различных граничных условиях. Характер изменения ФР в приведенных расчетах коррелирует с тем, что при увеличении крутизны стенок увеличивается среднеквадратичная плотность частиц и, соответственно, увеличивается рекомбинационный поток и растут значения ФР в области отрицательных энергий. Это может быть выявлено путем вычисления среднего значения межчастичного (ионного) расстояния.

Для изучения процессов рекомбинации – ионизации на стенке пару частиц надо описывать энергией пары, а не энергией ее части. В рассматриваемой работе [8] приведены ФР по полной энергии одной частицы. Такая характеристика приводит к сдвигу ФР в область отрицательных энергий. Это одна из причин того, что в работе [6] сделан неверный вывод о существенном влиянии стенок на рекомбинацию связанных пар. Другая причина заключается в том, что при изменении соотношения масс ионов и электронов меняется роль тяжелых частиц. С уменьшением их массы возрастает поглощение выделяемого при рекомбинации тепла из-за уменьшения времени электрон-ионной релаксации и роль столкновений ионов со связанными парами. Т.е. уменьшение массы тяжелых частиц приводит к эффективному понижению температуры и увеличению плотности – оба фактора увеличивают скорость рекомбинации. Использование в работе [8] в качестве характеристики пары полной энергии одной частицы тем более непонятно, что еще в работе [3] отмечена неадекватность такой характеристики для плазмы из частиц

равных масс. Но при использовании распределений по полной энергии одной частицы вид графиков более похож на рекомбинационное распределение. Т.е. авторами [8] игнорируется ранее сделанное верное утверждение.

О механизме влияния упругих стенок на рекомбинацию. В процессе рекомбинации электрона можно выделить две стадии: захват на уровень с энергией связи порядка температуры и дальнейшая релаксация вниз по энергетической оси. Характер движения электрона и влияние стенок на этих стадиях сильно различаются.

На первом этапе энергия электрона меняется за время пролета межчастичного расстояния на величину порядка энергии взаимодействия на среднем межчастичном расстоянии. При этом столкновение со стенкой вносит такой же вклад в релаксацию по энергии, как и столкновение с тяжелой частицей. Для оценки скорости стеночной рекомбинации на этом этапе в [8] приведен вывод аналога формулы Томсона. Формально применяя логику вывода Томсона к взаимодействию с абсолютно упругой стенкой, авторы [8] получают неверный результат. Нельзя проводить аналогию между столкновением двух электронов в поле иона и столкновением пары частиц с разными знаками зарядов с упругой стенкой. В отличие от иона, стенка после соударения не удержит электрон, который в лабораторной системе координат потерял энергию. Конечно же, имеется вероятность того, что столкнувшись со стенкой, две частицы полетят вместе при их положительной полной энергии. Но в этом случае при следующем столкновении со стенкой или частицей такая пара с большой вероятностью распадется. Столкновения со стенкой не меняют энергетического распределения, а вызывают лишь некоторое размывание ФР по полной внутренней энергии пары в системе ее центра масс. Поэтому неверна логика работы [8] и в другой части аналогии с моделью Томсона – "как и в томсоновской модели, здесь предполагается, что когда энергия связи частиц превышает температуру..., обратные акты ионизации возбужденных состояний малы по сравнению с релаксацией вниз по энергетической оси". Т.е. авторы полагают, что если столкнувшись со стенкой две частицы полетели вместе при их положительной полной энергии, то они и при следующем столкновении со стенкой отразятся от нее как целое с еще большей скоростью движения пары, как целого! Кроме этого авторы значительно завысили вероятность образования пар при столкновении со стенкой.

На другом этапе – рекомбинации уже образовавшихся связанных пар – значительное влияние стенок на скорость рекомбинации представляется сомнительным по следующей причине. Полная энергия пары не меняется при столкновении со стенкой. Стеночное перемешивание приводит к некоторому изменению полной энергии пары в системе ее

центра масс, но оно носит характер случайных блужданий по энергетической оси без характерного для переохлажденной плазмы дрейфа вниз, т.е. рекомбинации. Стеночное перемешивание не эквивалентно рекомбинации. Но для переохлажденной плазмы оно все же должно приводить к некоторому увеличению рекомбинационного потока, что впервые отмечено в работе [3].

Но есть и другой фактор, связанный со стенками (точнее, с конечностью числа частиц в модели) и приводящий к замедлению рекомбинации. Вблизи стенки частицы испытывают меньшее воздействие со стороны других частиц. Можно говорить о в два раза меньшей эффективной плотности плазмы для частиц, находящихся вблизи границы. Этот эффект, видимо, значительно превышает стимулирующее влияние стеночного перемешивания.

Результаты расчетов. С целью подтверждения приведенной выше аргументации были выполнены расчеты с тремя типами граничных условий: зеркальным отражением от стенок, периодическими граничными условиями и отражением центра инерции пар (модель мягких стенок [3]). Второе и третье граничные условия не меняют энергии связанных пар в системе их центра масс при отражении от стенок. Параметры расчета совпадают с [8]: длительность $t = 88\tau_{ei}$ (20 ленгмюровских периодов), плотность $N_i = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, начальная температура $T_0 = 0,1 \text{ эВ}$, радиус обрезания кулоновского потенциала $r_0 = 0,05N_i^{-1/3}$, число частиц в системе $2n = 256$. Средняя по расчету температура частиц $T_e \approx 0,2 \text{ эВ}$ была близка для всех расчетов.

На рис. 1 приведены ФР по полной энергии частиц, усредненные по всему времени расчета, для систем с различными граничными условиями. Следуя логике [8], при данных параметрах системы скорость стеночной рекомбинации в 200 раз превышает объемную, и доказательством стеночной рекомбинации является близость ФР к рекомбинационной. Однако незначительные отличия ФР с учетом стеночной рекомбинации (зеркальные стенки) и без нее (периодические и мягкие граничные условия) свидетельствуют об отсутствии столь значительного рекомбинационного потока за счет взаимодействия с упругой стенкой.

На рис. 2 приведены результаты двух расчетов с зеркальным отражением от стенок с различным соотношением масс ионов и электронов – ионная плазма ($m_i/m_e = 1$) и H -плазма ($m_i/m_e = 1843$). Длительность расчета $t = 14\tau_{ei}$ (2,2 ленгмюровских периода), число частиц в системе $2n = 10^4$, остальные параметры расчетов совпадают с предыдущими. Средняя по времени температура частиц $T_e \approx 0,2 \text{ эВ}$ для H -плазмы и $T_i = T_e \approx 0,17 \text{ эВ}$ для ион-ионной плазмы.

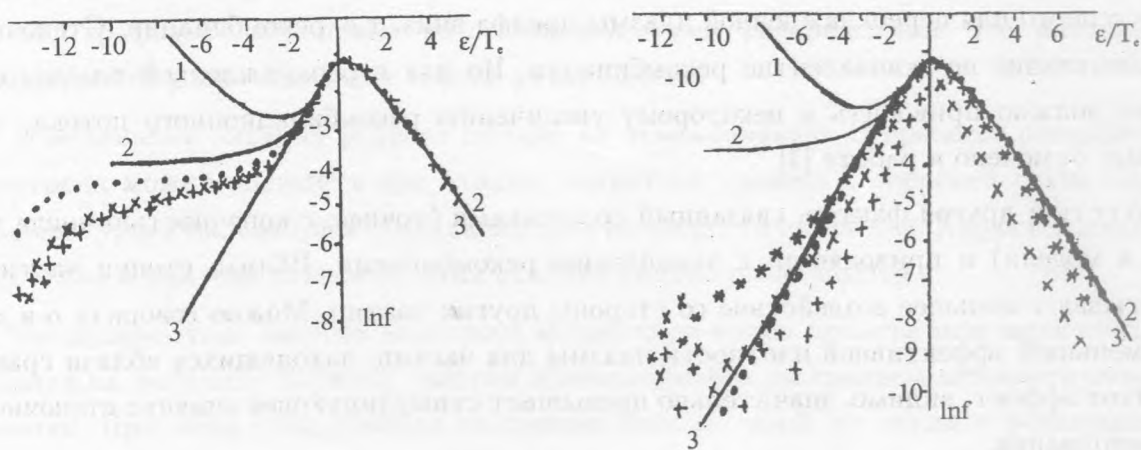


Рис. 1. ФР по полной энергии частиц, усредненные по всему расчету, для различных типов граничных условий: ● – зеркальные граничные условия, + – периодические граничные условия, × – модель отражения центра масс связанных пар. Сплошными кривыми под номерами 1, 2, 3 обозначены соответственно распределения Больцмана, стационарного рекомбинационного потока и приближение микрополевого дрейфа вверх.

Рис. 2. ФР частиц по полной энергии (+), энергии пар в системе их центра масс (×) и полной энергии пар (*) в лабораторной системе для расчета с зеркальным отражением от стенок для ион-ионной плазмы и распределение по полной энергии электронов (●) для H-плазмы. Сплошные кривые те же, что и на рис. 1.

ФР электронов для H-плазмы с высокой точностью совпадает с распределением, полученным на основе гипотезы об аномальном дрейфе вверх (связь между коэффициентами диффузии и дрейфа не удовлетворяет принципу детального равновесия).

Расчет для ион-ионной плазмы показывает, что ФР частиц по полной энергии значительно завышает число связанных состояний. Сравнение расчетов показывает, что для ион-ионной плазмы релаксация идет быстрее.

Более детальный анализ влияния граничных условий выходит за рамки физической задачи, это вопрос математического моделирования.

Приведенные результаты численного моделирования и их анализ показывают ошибочность объяснения замедленной рекомбинационной релаксации столкновениями частиц с упругой стенкой. Зеркальные стенки не оказывают существенного влияния на

скорость рекомбинационной релаксации. Стенки вносят некоторое перемешивание по различным степеням свободы пар частиц. В результате этого перемешивания меняются параметры столкновений в объеме и в полном соответствии с принципом релаксации к равновесию несколько увеличивается рекомбинационный поток. Но попытки приписать стенкам большее влияние на ионизационно-рекомбинационные процессы, чем они оказывают на самом деле, приводят к неверному выводу о рекомбинации на абсолютно упругой стенке. Известные формулы тройной рекомбинации описывают заполнение связанных состояний до значений энергии связи порядка одной-двух температур. Дальнейшая релаксация электронов вниз по энергетической оси в классической системе резко замедляется из-за адиабатического характера столкновений связанных и свободных электронов.

В заключение выражаю благодарность коллегам в Институте общей физики РАН за дискуссии по результатам моделирования плазмы методом частиц.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).
- [2] Maurogov S. A., Tkachev A. N., and Yakovlenko S. I. *Physica Scripta*, **51**, 498 (1995).
- [3] Майоров С. А., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, N 11, 44 (1994).
- [4] Игнатов А. М., Коротченко А. И., Макаров В. П. и др. УФН, **165**, N 1, 113 (1995).
- [5] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **165**, N 1, 117 (1995).
- [6] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 28 (1995).
- [7] Рухадзе А. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 40 (1995).
- [8] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 3 (1996).