

УДК 533.95

О РЕКОМБИНАЦИИ СИСТЕМЫ КЛАССИЧЕСКИХ КУЛОНОВСКИХ ЧАСТИЦ

С. А. Майоров

Методом компьютерного моделирования системы, состоящей из многих классических кулоновских частиц, проведено исследование процесса рекомбинации. Показано, что наблюдаемое ранее в расчетах метастабильное состояние медленно эволюционирует к равновесному распределению. Задержка рекомбинации связана с резким ослаблением взаимодействия связанных и свободных электронов при больших прицельных параметрах столкновений. Рассмотрены также релаксация к равновесию в двумерном случае и модель рекомбинации двух электронов в поле неподвижного иона, помогающие прояснить характер рекомбинации в классической постановке без учета квантовых эффектов.

В цикле работ по исследованию свойств классической кулоновской плазмы методом динамики многих частиц (ссылки и обзор см. [1, 2]) было обнаружено значительное замедление рекомбинации. Ограниченные возможности вычислительного эксперимента не позволяли определить время рекомбинации, но было установлено, что оно значительно превышает известное из теории тройной рекомбинации [3] значение. Исследование функции распределения электронов в области отрицательных энергий показало, что она кардинально отличается от стационарного рекомбинационного распределения. Данные расчетов привели к выводу о наличии у системы классических кулоновских частиц устойчивого квазистационарного (метастабильного) состояния. Теоретическое объяснение наблюдаемому в вычислительном эксперименте эффекту удалось найти с помощью модели случайных блужданий по энергетической оси, в которой связь между

коэффициентами диффузии и дрейфа не удовлетворяет принципу детального равновесия. В этой модели присутствует аномальный дрейф вверх по энергетической оси, а не вниз, как это следует из принципа детального равновесия.

В этой работе на основе более длительных и точных расчетов показано, что для объяснения наблюдаемого замедления рекомбинации нет необходимости в столь радикальных предположениях. Из расчетов следует, что рекомбинация в такой системе все-таки имеет место, хотя ее скорость в проведенных расчетах примерно на порядок меньше, чем это следует из работы [3]. Замедление рекомбинации на качественном уровне объясняется адиабатическим характером столкновений связанных и свободных электронов при далеких пролетах [4]. Подтверждением этой точки зрения являются приведенные в настоящей работе результаты расчета двумерной задачи и системы из трех частиц – неподвижного иона и двух электронов, помещенных в куб с термостатирующими стенками.

Моделирование методом частиц. Используемая здесь методика исследования свойств классической кулоновской плазмы на основе численного интегрирования уравнений динамики многих частиц подробно описана в работах [1, 5, 6]. Вкратце суть ее такова.

Рассматривается временная эволюция системы из $2n$ частиц, заключенной в куб с упруго отражающими стенками. Траектории n положительно и n отрицательно заряженных частиц определяются путем численного решения уравнений Ньютона:

$$d^2 r_k / dt^2 = F_k / m_k, \quad F_k = \sum_{l \neq k}^{2n} f_{kl}, \quad k = 1, 2, \dots, 2n. \quad (1)$$

Здесь $r_k(t)$ – радиус-вектор k -той частицы, характеризующейся массой m_k и зарядом q_k . Сила кулоновского взаимодействия f_{kl} между частицами на расстояниях менее r_0 модернизировалась в соответствии с взаимодействием однородно заряженных взаимно проницаемых сфер диаметром r_0 [6]. Эта величина выбиралась значительно меньше среднего межчастичного расстояния и такой, чтобы не оказывала влияния на исследуемые характеристики. Обычно это проверялось путем сравнения результатов расчетов с различными r_0 .

В начальный момент времени все частицы равномерно разбрасывались внутри куба, длина ребра которого выбиралась такой, чтобы обеспечить нужную плотность плазмы. Распределение скоростей выбиралось максвелловским с некоторой начальной температурой T_0 .

Для численного интегрирования системы уравнений (1) при исследовании фундаментальных свойств плазмы наиболее подходящим является метод типа частица-частица [6], в котором учитывается взаимодействие каждой частицы с каждой. При реализации этого метода был разработан алгоритм, использующий специфику классической кулоновской плазмы для значительного сокращения числа операций [1]. В его основе лежало выделение у каждой частицы ближайших частиц и учет взаимодействия между ними по вычислительной схеме более высокого порядка точности. В дальнейшем метод был усовершенствован – у каждой частицы определялось по две ближайших частицы каждого знака [5]. Сделано это было для более точного расчета процесса рекомбинации, т.к. было обнаружено, что погрешности расчета приводят к усилению рекомбинации. При выполнении приведенных ниже расчетов использовалась новая модификация вычислительного алгоритма. Введен этап предикции для вычисления средних сил и их аппроксимация линейной функцией. Дополнительно введен контроль точности на каждом шагу и автоматический выбор шага по времени. Это позволило в несколько раз повысить точность расчета неидеальной плазмы, увеличить число частиц в системе.

Программный комплекс PLASMIC, реализующий изложенный алгоритм, имеет обширную диагностику для исследования свойств плазмы на основе анализа траекторий отдельных частиц. Она включает в себя расчет термодинамических характеристик, функций распределения (ФР) по кинетической, потенциальной и полной энергиям электронов, ионов и пар частиц, по проекциям скоростей, распределений микрополей и их корреляционных функций, вычисление кинетических коэффициентов; предусмотрена возможность визуализации траекторий отдельных частиц.

Обсудим часть диагностики, связанной с изучением рекомбинации. В ранних работах (см. обзор [1, 2]) при изучении плазмы из частиц с сильно различающимися массами в качестве энергетической характеристики частицы использовалось значение ее полной энергии:

$$\epsilon_i^k = m_i v_i^2 / 2, \quad \epsilon_i = \epsilon_i^k + q_i \sum_{k \neq l}^{2n} \frac{q_k}{r_l - r_k} G(r_l - r_k / r_0),$$

где $G(x) = 1$ при $x \geq 1$, $G(x) = 2, 4x - 4x^3 + 3x^4 - 0, 4x^6$ при $x < 1$ – сглаживающая функция, обеспечивающая непрерывность и гладкость силы кулоновского взаимодействия на близких расстояниях [1, 6]. В работе [5] вычислялись энергетические характеристики пар взаимоближайших частиц – полная энергия, кинетическая энергия движения частиц как целого, полная энергия в системе центра инерции пары (или внутренняя энергия пары частиц).

Для исследования процесса рекомбинации наиболее адекватной характеристикой связанной пары является ее полная энергия, т.е. сумма кинетических энергий и потенциальной энергии взаимодействия пары. Ее значение не меняется при столкновении пары с упругой стенкой.

Для уменьшения влияния столкновений со стенками на перераспределение энергии пары между поступательным движением как целого и внутренней энергией были использованы граничные условия с отражением центра масс связанных пар [5]. Однако и с такими граничными условиями при построении ФР по внутренней энергии ближайших пар было обнаружено некоторое количество отдельных сильно связанных пар. Но тогда это было объяснено стохастизирующим влиянием погрешностей и большим временем жизни сильно связанных пар из-за дипольного характера взаимодействия свободных и связанных электронов.

Результаты расчетов динамики многих частиц. Проведены расчеты плазмы водорода, состоящей из электронов и ионов с реальными значениями масс и параметрами: $N_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $T_0 = 0,01 \text{ эВ}$, $T_e = 0,03 \text{ эВ}$, $2n = 4000$, время расчета $t = 850\tau_{ei}$, где $\tau_{ei} = N_i^{-1/3} / (2T_e/m_e)^{1/2}$ – время пролета электроном среднего межоионного расстояния. Температура электронов T_e определена в конце расчета по средней кинетической энергии. Параметр неидеальности $\delta = 2e^6 N_e / T_e^3$ при этих значениях параметров плазмы равен $\delta = 0,023$.

На рис. 1 показано изменение во времени числа электрон-ионных пар, полная энергия которых меньше $-2T_e$, $-4T_e$, $-6T_e$. Из него следует, что уже при временах $t \approx 50\tau_{ei}$ появляется заметное количество пар с полной энергией меньше $-4T_e$, $-6T_e$. Начиная с времени $t \approx 100\tau_{ei}$ число пар с полной энергией меньше $-4T_e$, $-6T_e$ зависит от времени почти линейно, т.е. можно говорить о постоянном рекомбинационном потоке. Определенное по наклону прямой (пунктирные прямые на графике) время рекомбинации составляет $\tau_{рек} \approx 13000\tau_{ei}$. Время рекомбинации по формуле Гуревича и Пятаевского [3] $\tau_{рек} \approx 2000\tau_{ei}$ при использовании значения кулоновского логарифма для связанных частиц $\Lambda = 0,5 \ln(1 + z^2) = 0,35$. Для рекомбинации при моделировании методом динамики многих частиц имеется приблизительно 6,5-кратное замедление. При использовании обычного значения кулоновского логарифма $\Lambda = 0,5 \ln(1 + 9/4\pi\delta) = 1,72$ отличие 30-кратное. Возможные причины такого замедления рекомбинации в системе классических кулоновских частиц по сравнению с теорией рекомбинации на основе диффузионно-дрейфовой модели рассмотрены ниже.

На рис. 2 показана ФР связанных пар в области отрицательных энергий для не-

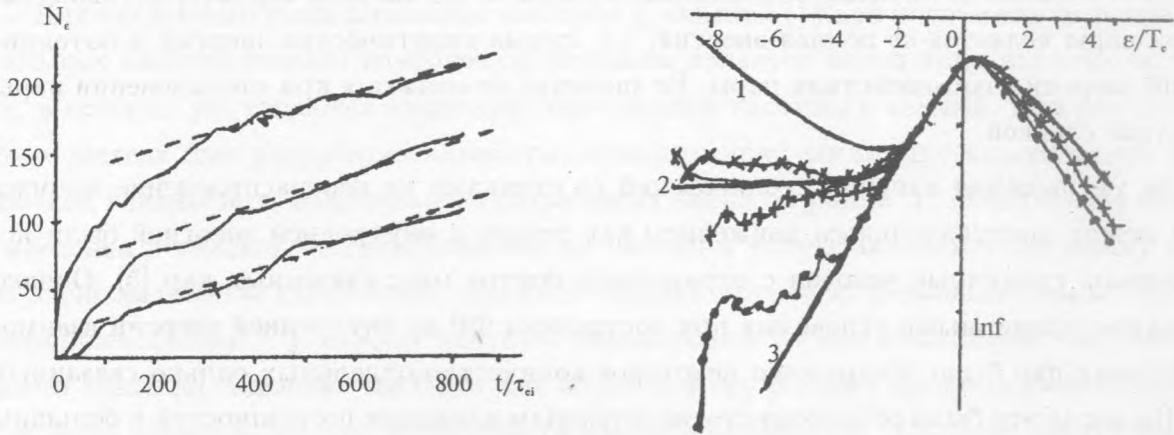


Рис. 1. Зависимость от времени числа электронно-ионных пар, полная энергия которых меньше $-2T_e$, $-4T_e$, $-6T_e$ (сверху вниз), τ_{ei} - время пролета электроном среднего межионного расстояния.

Рис. 2. ФР связанных пар в области отрицательных энергий для моментов времени $t/\tau_{ei} = 50(\bullet)$, $200(+)$, $850(\times)$. Сплошными кривыми показаны ФР Больцмана (1), стационарного рекомбинационного потока (2) и приближение микрополевого дрейфа вверх (3).

скольких моментов времени. Для начального этапа процесса рекомбинации характерным является резко спадающее в зависимости от энергии связи распределение (близкое к экспоненте), хорошо совпадающее с микрополевым распределением. Следует отметить, что это совпадение является следствием того факта, что при построении микрополевого распределения использовались аппроксимационные зависимости с константами, полученными из условия совпадения с результатами моделирования. При дальнейшей эволюции система кулоновских частиц достигает рекомбинационного распределения и стремится далее к распределению Больцмана. Ограниченная мощность ЭВМ не позволяет довести расчет до достижения распределения Больцмана, но ясно, что оно является направлением релаксации.

Для демонстрации достижения стационарного состояния рассмотрим релаксацию в двумерной системе с такими же плотностью и температурой. Графики ФР по полной энергии для двумерной системы в различные моменты времени приведены на рис. 3. Полученное стационарное распределение близко к распределению Больцмана, отличия при больших отрицательных энергиях обусловлены модификацией кулоновского потенциала

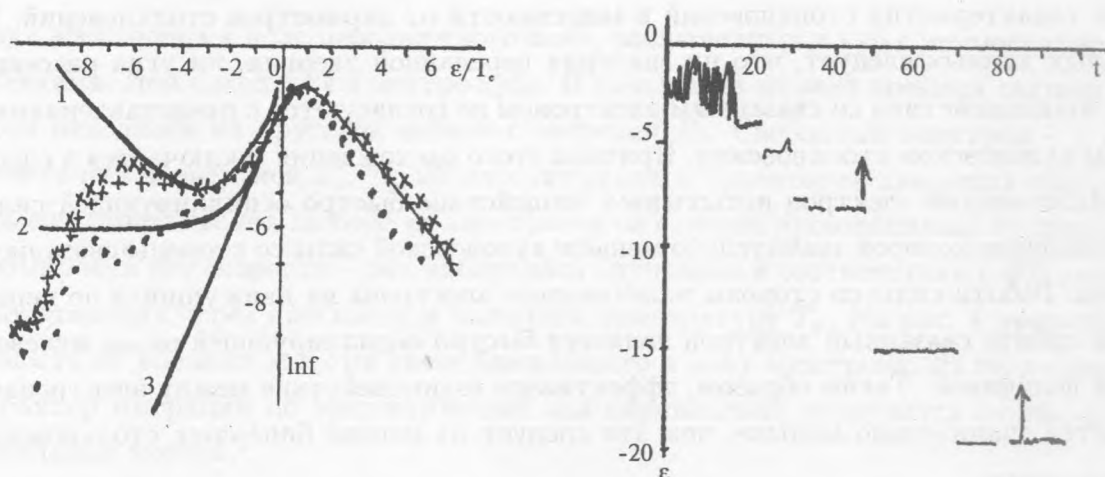


Рис. 3. Двумерный расчет ФР по полной энергии электронов для моментов времени $t/\tau_{ei} = 50(\bullet)$, $100(+)$, $200(\times)$. Сплошные кривые те же, что и на рис. 2.

Рис. 4. Расчет динамики двух электронов в кубе единичного размера с термостатирующими стенками и неподвижным ионом в центре при параметрах системы: $E_0 = -2$, $T_w = m = e = 1$. Приведена энергия связи финитного электрона $V^2/2 - 1/r = \epsilon$, стрелка вверх показывает момент обмена связанного и свободного электронов.

на близких расстояниях. Очевидно, что аномального дрейфа вверх в приведенном расчете не наблюдается. В двумерной системе релаксация происходит быстрее из-за того, что близкие столкновения происходят чаще. В ней также ослаблено влияние граничных эффектов при том же числе частиц в системе из-за другого соотношения объема и поверхности, точность расчета такой системы значительно выше. Поэтому факт установления равновесного состояния однозначно свидетельствует об отсутствии эффекта аномального дрейфа вверх по энергетической оси у системы частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Результаты расчетов динамики трех тел. Исследовать характер взаимодействия свободных и связанных частиц применительно к задаче рекомбинации в плазме удобно на примере задачи трех тел – двух электронов в поле неподвижного иона. Для них можно выполнить вычисления очень точно и в явном виде проследить за эволюцией частиц.

С целью изучения влияния эффекта адиабатичности столкновения свободных и связанных электронов (впервые отмеченного в работе [4]) была проведена большая серия

расчетов характеристик столкновений в зависимости от параметров столкновений. Из полученных данных следует, что ни значения переданной энергии, ни угла рассеивания при взаимодействии со связанным электроном не согласуются с представлениями о бинарном кулоновском столкновении. Причина этого расхождения заключается в следующем. Налетающий электрон испытывает воздействие быстро осциллирующей силы, среднее значение которой значительно меньше кулоновской силы со стороны связанного электрона. Работа силы со стороны налетающего электрона на движущийся по периодической орбите связанный электрон является быстро осциллирующей около нулевого значения величиной. Таким образом, эффективное взаимодействие между электронами оказывается значительно меньше, чем это следует из модели бинарных столкновений двух электронов.

На основании исследования столкновений свободного и связанного электронов в поле неподвижного иона можно описать типичные столкновения следующим образом.

1) Прицельный параметр налетающего электрона меньше или порядка диаметра орбиты связанного электрона. В этом случае происходит сильное взаимодействие. Угол рассеяния принимает случайные значения в диапазоне от $-\pi$ до π , а передача кинетической энергии порядка энергии связи. Соответственно, если налетающий электрон имеет небольшую кинетическую энергию, то он ее приобретает, а связанный электрон опускается еще глубже в потенциальную яму иона. И наоборот, если налетающий электрон имеет большую кинетическую энергию, то он в столкновении ее обычно теряет, ионизуя или переводя связанный электрон на более высокую орбиту. При такого рода столкновениях велика вероятность у электронов поменяться местами, т.е. свободный электрон становится связанным и наоборот.

2) Прицельный параметр налетающего электрона много больше диаметра орбиты связанного электрона, но его кинетическая энергия меньше энергии связи с диполем. В этом случае происходит сильное взаимодействие свободного электрона с диполем с передачей энергии порядка энергии связи.

3) Прицельный параметр налетающего электрона много больше диаметра орбиты связанного электрона, а его кинетическая энергия больше энергии связи с диполем на прицельном параметре. В этом случае происходит адиабатическое взаимодействие свободного электрона с диполем без заметной передачи энергии. При не очень больших значениях прицельного параметра возможно рассеяние на заметный угол, но значительно меньше угла рассеяния на кулоновском центре.

Для демонстрации поведения связанного электрона в плазме рассмотрим эволюцию

двух электронов в поле неподвижного иона, заключенных в куб с термостатирующими стенками. Ион находится в центре куба. В начальный момент времени связанный электрон находился на круговой орбите с энергией E_0 . Свободный электрон – у стенки с кинетической энергией T_w . Далее рассчитывались траектории движения электронов. В момент столкновения любого из электронов со стенкой производилась процедура перенормировки его скорости – она выбиралась случайной в соответствии с ФР электронов, пролетающих через плоскость и имеющих температуру T_w . На рис. 4 приведена зависимость от времени энергии связи ближайшего к иону электрона. Из него следует, что характер миграций по энергетической оси кардинально отличается от диффузионно-дрейфовой модели.

На основании анализа задачи о взаимодействии свободного и связанного электронов в поле неподвижного иона можно сделать вывод о значительном отклонении сечений таких столкновений от кулоновских. При прицельных параметрах, больших по сравнению с радиусом орбиты связанного электрона, угол рассеяния налетающего электрона и передача энергии между связанным и свободным электронами оказываются значительно меньше, чем это следует из теории кулоновских столкновений. Можно говорить об адиабатическом характере наиболее частых в плазме столкновений при далеких пролетах. Значительная передача энергии происходит либо в случае прицельного параметра порядка радиуса орбиты связанного электрона, либо при небольшой энергии налетающего электрона, когда происходит его захват и падение на притягивающий его диполь. В этом случае происходит столкновение с передачей свободному электрону энергии порядка энергии связи. Такой характер столкновений не позволяет использовать для описания процесса тройной рекомбинации диффузионно-дрейфовую теорию из-за большой величины микроскачков.

На основании проведенных расчетов можно сделать вывод о значительном замедлении рекомбинации в системе классических кулоновских частиц. Отличие достигает 10 раз при степени неидеальности порядка единицы. Известные формулы тройной рекомбинации описывают заполнение связанных состояний с энергией связи порядка температуры. Дальнейшая рекомбинационная релаксация замедляется, причем чем глубже опускается электрон, тем дольше он остается на связанной кеплеровской орбите.

Полученные результаты требуют пересмотра сложившихся представлений о процессе тройной рекомбинации электронов в классической кулоновской плазме. В частности, вызывает сомнение правомерность применения уравнения Фоккера – Планка для описания процесса рекомбинации и определения числа сильно связанных электронов в

переохлажденной плазме. Построение более точной модели рекомбинации для классических частиц должно основываться на уравнении Смолуховского. Но применимость подхода на основе уравнений классической механики ограничена проявлением квантовых эффектов.

В заключение выражаю благодарность коллегам в Институте общей физики за продолжительные дискуссии по проблеме задержки рекомбинации плазмы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Математическое моделирование, N 7, 3 (1992).
- [2] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).
- [3] Гуревич А. В., Питаевский Л. П. ЖЭТФ, **46**, N 4, 1281 (1964).
- [4] Беляев С. Т., Будкер Г. И. В сб. Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций. Т. 3, изд. АН СССР, 1958, с. 41.
- [5] Майоров С. А., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, N 11, 44 (1994).
- [6] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., Мир, 1987.

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 14 января 1997 г.