УДК 533.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ КУЛОНОВСКИХ ЧАСТИЦ

С. А. Майоров

Методом компьютерного моделирования из первопринципов для системы, состоящей из многих классических кулоновских частиц, проведено исследование столкновений в плазме. Показано, что хорошее согласие с результатом квазибинарной теории получается при выборе значения верхнего предела обрезания кулоновских столкновений порядка среднего межионного расстояния, а не дебаевского радиуса, как это обычно принято.

Введение

Столкновениям в плазме посвящено большое число работ, но возможности компьютерного моделирования из первопринципов *(ab initio)* позволяют по-новому взглянуть на некоторые общепринятые положения современных кинетических теорий. В цикле работ по исследованию фундаментальных свойств классической кулоновской плазмы методом динамики многих частиц (ссылки и обзор см. в [1 – 2]) уже было проведено исследование различных предположений, закладываемых в основу теории для определения термодинамических характеристик, распределений микрополей, экранирования, столкновений, тройной рекомбинации. Настоящая работа продолжает этот цикл и посвящена вопросу определения частоты столкновений в идеальной плазме.

Особенностью статистической механики заряженных частиц, осложняющей построение кинетических моделей, является дальнодействующий характер кулоновского взаимодействия. Следствием этого является расходимость интеграла столкновений Больцмана для плазмы. Современная теория столкновений в идеальной плазме основывается на работе Ландау [3], в которой интеграл столкновений Больцмана упрощается путем разложения по малому параметру энергии взаимодействия частиц. Расходимость

получаемого интеграла столкновений устранялась путем ограничения верхнего предела интегрирования по прицельному параметру дебаевским радиусом. Расходимость на нижнем пределе обусловлена предположением о малости передаваемого в одном столкновении импульса и устранялась введением минимального прицельного параметра. Обоснованность обрезания кулоновских сечений для далеких пролетов мотивируется эффектом экранирования в плазме и слабой логарифмической зависимостью частоты столкновений от радиуса обрезания. Первый аргумент основан на использовании решения задачи об экранировании неподвижного заряда в плазме, но не обосновано применение этого результата к задаче динамического экранирования заряда. Второй аргумент в случае качественного различия в выборе радиуса обрезания не работает. Несомненно лишь то, что дебаевский радиус является верхней оценкой для учитываемых прицельных параметров.

Другой подход к учету столкновений, предложенный Балеску и Леннардом [4, 5], основывается на понятии динамической поляризуемости плазмы. Но при этом значение диэлектрической проницаемости в области малых волновых чисел соответствует обрезанию на дебаевском радиусе. Таким образом вводится эффективный радиус взаимодействия.

Н. Н. Боголюбов в предисловии к работе [6] пишет, что в уравнении Больцмана имеется внутреннее противоречие. С одной стороны, делается предположение о стохастичности (гипотеза хаоса – Stosszahlansatz), при котором движение молекул трактуется как случайный процесс и вводится в рассмотрение статистический механизм бинарных соударений. С другой стороны, входящие в уравнение сечения получаются из решения уравнений динамики. В наибольшей мере это противоречие должно проявляться в системе из частиц с дальнодействующим потенциалом – плазме.

Кога [7] развивает подход к устранению расходимости интеграла столкновений, основанный на выделении у каждой частицы ближайших соседей и учете взаимодействия с ними. Его трактовка причины расходимости интеграла столкновений Больцмана для плазмы представляется достаточно убедительной. Но представлены только качественные соображения, не подтвержденные какими-либо расчетами. Поэтому представляет интерес использовать возможности компьютерного моделирования для получения дополнительных данных.

В связи с широким распространением мнения об экранировании как причине физической сходимости интеграла столкновений Больцмана, возникает вопрос, а какова длина рассеяния в структурах без экранирования, например, компенсированных полупровод-

никах? Ведь иногда утверждается, что без экранирования длина свободного пробега равна нулю. В то же время ясно, что это не так, ведь среднее поле, вычисленное Хольцмарком для системы случайно расположенных в пространстве тел, взаимодействующих по закону Кулона, является конечной величиной.

Изучение столкновений актуально не только с практической целью уточнения кинетических коэффициентов, но важно и для прояснения физической сущности кинетических теорий. В частности, на основе полученных в вычислительных экспериментах результатов можно говорить о большем, чем это обычно принято, значении межчастичного расстояния между ионами, необходимом при анализе процессов в плазме. Этот факт уже отмечался в работе [8], где исследовалось затухание автокорреляционных функций микрополя. Недооценка этой характерной длины традиционно идет от кинетических теорий, построенных для газов – систем с короткодействующим потенциалом. В кинетической теории для газов расстояние между частицами не играет никакой роли: имеет значение лишь размер атома и длина свободного пробега. А в плазме эта длина определяет характерный размер неоднородности электрического поля. Другая характерная длина в плазме, дебаевский радиус экранирования, по ряду причин часто подменяет среднее межчастичное расстояние.

Подход Власова позволяет естественным образом избежать проблемы расходимости, но его уравнение имеет дело с усредненной плотностью заряда. Тем самым вводится некоторый масштаб пространственного усреднения, больший среднего межчастичного расстояния. В [9, 10] при критике подхода на основе уравнения Больцмана для анализа плазмы он отмечает, что для плазмы учет последовательных парных взаимодействий совершенно не отражает реальности из-за невыполнимости условий парности столкновений. В то же время, отмечая, что в интеграле столкновений Больцмана надо учитывать столкновения с прицельным параметром порядка половины межчастичного, он пишет, что существенную роль должны играть силы взаимодействия на расстояниях, больших расстояния между частицами, и действие этих сил не может быть учтено обычной схемой кинетического уравнения. Противоречия здесь нет. Это означает лишь то, что учет далеких взаимодействий надо проводить не по бинарной теории.

В работах Персико [11], Ленгмюра [12], Ландау [3], Давыдова [13], Дрювестейна [14], Спитцера [15 – 17] исследовались столкновения в плазме, и в большинстве случаев при расчете частоты столкновений в качестве верхнего значения параметра обрезания предлагалось использовать радиус Дебая. Среднее межчастичное расстояние в качестве параметра обрезания выбирали Давыдов, Коулинг [18] и Чандрасекар [19], который ис-

следовал динамику звезд, где эффекта экранирования нет. Чандрасекар считал, что расходимость возникает из-за неправильного применения решения задачи двух тел для описания далеких пролетов и радиус обрезания должен быть несколько больше среднего межчастичного расстояния. В настоящее время, следуя работам Ленгмюра, Ландау, Спитцера и др., в качестве верхнего предела обрезания используется дебаевский радиус. Борьба мнений здесь сосредоточена вокруг принципиально важного вопроса: насколько правильно с помощью парных столкновений можно учесть множественность столкновений в плазме. Сторонники критического отношения к попыткам использования интеграла столкновений Больцмана для описания плазмы (Власов, Чандрасекар, Кога и др.) говорят о возможности учета столкновений в бинарном приближении только для прицельных параметров, меньших среднего межчастичного расстояния. С другой стороны, учитывая столкновения с прицельными параметрами до величины дебаевского радиуса, пытаются учесть далекие столкновения, которые, безусловно, важны. Но пока нет системы макроскопических уравнений, удовлетворительно описывающих динамику плазмы во всех режимах, то различные подходы – это методы *ad hod*, т.е. разрабатываемые для решения конкретной задачи и не имеющие общности [7]. Моделирование из первопринципов, выполненное в настоящей работе, позволяет получить ответ на конкретный вопрос о зависимости длины свободного пробега от параметров плазмы. Критерием подобия термодинамических характеристик равновесной плазмы является показатель неидеальности плазмы [20], поэтому можно, в зависимости от показателя неидеальности, получить значение кулоновского фактора (логарифма), как феменологической константы для описания длины свободного пробега заряженных частиц в плазме.

Результаты исследования динамики многих кулоновских частиц на примере задачи о торможении электронного пучка в среде ионов, приведенные в настоящей работе, показывают, что хорошее совпадение для силы трения электронного пучка в поле тяжелых ионов получается при выборе верхнего значения прицельных параметров порядка межчастичного расстояния.

Постановка задачи при моделировании столкновений методом частиц

О методе динамики многих частиц. Используемая здесь методика исследования свойств классической кулоновской плазмы на основе численного интегрирования уравнений динамики многих частиц подробно описана в работах [21, 22]. 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

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

Здесь $r_k(t)$ – радиус-вектор k-той частицы, каждая из которых характеризуется массой m_k и зарядом q_k. Сила кулоновского взаимодействия f_{kl} между частицами на расстояниях между частицами менее r_0 принималась соответствующей взаимодействию однородно заряженных взаимно проницаемых сфер диаметром r_0 [22]. Эта величина выбиралась значительно меньше среднего межчастичного расстояния, такой, чтобы она 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 в соответствии с поставленной задачей об определении силы трения.

Для численного интегрирования системы уравнений Ньютона при изучении фундаментальных свойств плазмы наиболее подходящим является метод типа частица-частица [22], в котором учитываются взаимодействия каждой частицы с каждой. При реализации этого метода был разработан алгоритм, использующий специфику классической кулоновской плазмы для значительного сокращения числа арифметических операций. В его основе лежало определение для 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 [21]. Сделано это было для более точного расчета процесса рекомбинации. При выполнении приведенных ниже расчетов использовалась модификация алгоритма. Введены этап предикции для вычисления средних сил, их аппроксимация линейной функцией времени, контроль точности на каждом шагу и автоматический выбор шага по времени. Эти усовершенствования позволили в несколько раз повысить точность расчета, особено для неидеальной плазмы, и увеличить число учитываемых частиц в системе.

Программный комплекс PLASMIC, реализующий изложенный алгоритм, имеет обширную диагностику для изучения свойств плазмы на основе анализа траекторий

отдельных частиц. Она включает в себя расчет термодинамических характеристик, функций распределения 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.

Особенности метода динамики многих частиц для расчета характеристик столкновений. Используемая здесь методика исследования свойств плазмы несколько отличается от применявшейся ранее при расчете средних длин свободного пробега – длин поворота электронов на угол $\pi/2$ [23]. Основной целью предыдущих исследований было изучение неидеальной плазмы, здесь же основное внимание уделяется случаю идеальной плазмы. Отмеченные ниже особенности привели к тому, что при предыдущих наших расчетах получилось очень хорошее совпадение с результатом бинарной теории, и значение вычисленного кулоновского фактора хорошо совпало с традиционным значением кулоновского логарифма.

В отличие от всего цикла работ (ссылки см. в [1, 2]), в этой работе использовались периодические граничные условия. Причина отказа от зеркальных условий отражения частиц от стенок заключается в следующем. Около зеркально отражающей стенки частицы испытывают меньшее воздействие со стороны других частиц – у границы эффективная плотность плазмы в два раза ниже. Ослабление микрополей для частиц вблизи стенок недостаточно учтено при интерпретации результатов вычислительных экспериментов из-за того, что распределение микрополей, как показано в [24], удовлетворительно совпадает с хольцмарковским уже для трех десятков частиц. Но это распределение получено для частиц в центре шара, а не для границы сосуда с частицами. Поэтому эффект влияния зеркальных стенок представляется важным при изучении столкновений.

Второе отличие вызвано спецификой рассматриваемой задачи: рассеяние электронного пучка на тяжелых ионах. Рассматривался случай достаточно идеальной плазмы, когда различие дебаевского радиуса и межионного расстояния достаточно велико, чтобы логарифм их отношения был наблюдаем в результатах вычислений методом динамики многих частиц. Но при этих условиях минимальный прицельный параметр оказывается значительно меньше среднего межчастичного расстояния, поэтому нельзя использовать модификацию кулоновского потенциала на близких расстояниях, исходя из критерия малости по сравнению со средним межчастичным расстоянием, как это делалось раньше. Приходится выбирать его по более жесткому критерию малости по сравнению с ми-

нимальным прицельным параметром. Кроме того, длительность расчета должна быть таковой, чтобы в этот диапазон прицельных параметров попало достаточно много частиц.

Третье отличие опять же связано с "вычислительной кухней", но как показывают результаты расчетов, от таких деталей зависит правильность физического вывода. Электронный пучок, запущенный параллельно оси куба в периодической системе, может накапливать возмущения, т.к. они также оказываются периодическими. В непериодической системе (с зеркально отражающими стенками) этот эффект также имеет место. Для избежания этого своеобразного эффекта каналирования пучок пускался под углом, причем так, чтобы направляющие косинусы не составляли кратных чисел, и ионы выбирались очень тяжелыми, но имеющими небольшую скорость, чтобы за время расчета ионная конфигурация менялась.

Четвертое отличие связано с физической постановкой задачи. В отличие от работы [23], где решалась задача расчета "кулоновского фактора" и длин поворотов электронов на прямой угол в плазме с максвелловским распределением электронов, здесь решается задача торможения моноэнергетического направленного электронного пучка. Эта задача имеет точное аналитическое решение (в бинарном приближении) с одним свободным параметром – радиусом обрезания учитываемых столкновений. Путем сравнения с ней можно определить границу учитываемых прицельных параметров для совпадения с результатами моделирования динамики многих частиц.

Сила "трения" при рассеянии в поле Кулона. Рассмотрим решение задачи, из моделирования которой можно будет определить кулоновский логарифм [25].

На неподвижный заряд e из бесконечности налетает со скоростью u однородный плоский поток частиц с массой m, зарядом e, числом частиц в единице объема n. В приближении парных столкновений, когда учитывается взаимодействие частиц с неподвижным центром и не учитывается их взаимодействие между собой, средняя сила со стороны частиц, имеющих прицельный парамер меньше ρ_{max}, равна $F = 4\pi\Lambda e^4 n/mu^2$, где $\Lambda = \ln(\sqrt{\rho_{max}^2 + \rho_{min}^2}/\rho_{max}) \approx \ln(\rho_{max}/\rho_{min})$ – кулоновский логарифм, $\rho_{min} = e^2/mu^2$ – значение прицельного параметра, при котором частица отклоняется на прямой угол. Отметим, что ρ_{min} не имеет отношения к нижнему пределу обрезания, который использовал Ландау. При решении данной задачи учитываются все столкновения с $\rho < \rho_{max}$.

В вычислительном эксперименте использовался результат, полученный для силы трения электронного пучка о неподвижный ион, для сравнения с рассеянием электронного пучка на бесконечно тяжелых или тяжелых ионах. Значение средней силы в компью-

терном эксперименте может быть определено по изменению суммарного импульса ионов за единицу времени. Сравнение полученного в вычислительном эксперименте значения средней силы с решением задачи в приближении бинарных столкновений позволяет определить значение ρ_{max}.

Сила трения, полученная для пучка, не расходится для малых прицельных параметров, поэтому выбранная задача представляется удобной для определения кулоновского фактора, описывающего множественность столкновений в плазме.

Результаты моделирования динамики многих частиц

Было проведено большое количество расчетов с различными параметрами вычислительной модели. Рассмотрим некоторые из полученных результатов.

Результаты расчетов динамики многих частиц. Проведены расчеты плазмы, состоящей из электронов и однократно заряженных тяжелых ионов с отношением масс $m_i/m_e = 10^3, 10^4, \infty$. Рассмотрим плазму с параметрами $N_e = 10^{17}\,см^{-3}$, $T_e = 1, 2, 4, 5, 10\,эВ$, числом частиц в системе $2n = 1024$, временем расчета $t_0 = (20 - 100)\tau_{ei}$, где $\tau_{ei} = N_i^{-1/3}/(3T_e/m_e)^{1/2}$ – время пролета электроном среднего межионного расстояния. Температура электронов T_e в данной постановке задачи имеет смысл условной характеристики величины кинетической энергии. Параметр неидеальности плазмы $\delta = 2e^6 N_e/T_e^3$ при этих значениях параметров равен $\delta = 6(10^{-4} - 10^{-7})$, число частиц в сфере Дебая меняется от 2 до 60. В результате расчета по скорости потери импульса электронов определялась средняя сила торможения электронной компоненты, далее по силе трения рассчитывались кулоновский логарифм и верхний предел интегрирования по прицельному параметру.

Результаты и параметры расчетов при $m_i/m_e = 10^3$ приведены в таблице. Для всех расчетов вычисленный верхний предел обрезания по прицельному параметру имеет порядок межчастичного расстояния, имеющиеся отличия не носят систематического характера и зависят, видимо, от параметров модели – числа частиц, массы ионов, радиуса модификации кулоновского потенциала на близких расстояниях, времени счета. С целью контроля выхода на стационарные значения характеристик столкновений (кулоновского логарифма, параметра обрезания) они рассчитывались для каждого момента времени. Длительность расчета выбиралась такой, чтобы изменение импульса электронной компоненты составляло не более 10% от первоначального значения и в плазме не успевали развиться неустойчивости.

Таблица

T_e, эВ	Λ	Λ^*	r_D/r_{ii}	ρ_{max}/r_{ii}	t_0/τ_{ei}
1	3,9	3,2	1,1	0,7	20
2	4,9	3,7	1,5	0,45	50
4	6	4,5	2,2	0,5	20
5	6,3	4,6	2,5	0,5	50
10	7,4	5,9	3,5	0,8	100

Примечание: в таблице приведены средняя кинетическая энергия электронов, кулоновский логарифм Λ, кулоновский фактор (логарифм) Λ^*, определенный по результатам моделирования, радиус Дебая в единицах среднего межчастичного расстояния r_D/r_{ii}, радиус обрезания в единицах среднего межчастичного расстояния ρ_{max}/r_{ii}, определенный по результатам расчетов, длительность расчета t_0/τ_{ei}.

Во многих практически важных случаях мы имеем дело с плазмой многозарядных ионов. Практический интерес представляют коэффициенты переноса для случая заряда ионов, отличного от единицы. Кроме этого, на значение кулоновского логарифма при высоких температурах оказывают влияние квантовые эффекты. Но эти вопросы выходят за рамки данной работы.

Заключение

Интеграл столкновений Больцмана не применим для плазмы из-за небинарности и немгновенности взаимодействия. Но при выборе верхнего предела интегрирования кулоновских сечений равным межчастичному расстоянию получается хорошее совпадение с результатами моделирования из первопринципов для длины свободного пробега электронов в идеальной плазме.

В известных формулах для кинетических коэффициентов, использующих частоту столкновения частиц в плазме, следует использовать значение кулоновского логарифма, которое получается при выборе верхнего предела интегрирования равным межионному расстоянию.

В заключение выражаю благодарность коллегам в Институте общей физики РАН за интерес к работе и А. А. Рухадзе за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).

[2] Mayorov S. A., Tkachev A. N., and Yakovlenko S. I. Physica Scripta, **51**, 498 (1995).

[3] Ландау Л. Д. ЖЭТФ, **7**, 203 (1937); Phys. Z. Sow. Union, **10**, 154 (1936).

[4] Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц. М., Мир, 1976.

[5] Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов. М., Наука, 1971.

[6] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М., ОГИЗ, 1946.

[7] Кога Т. Введение в кинетическую теорию стохастических процессов в газах. М., Наука, 1983.

[8] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ДАН СССР, **290**, N 1, 106 (1988).

[9] Власов А. А. Теория многих частиц. М.-Л., ГИТТЛ, 1950.

[10] Власов А. А. Статистические функции распределения. М., Наука, 1966.

[11] Persico E. Monthly Notices, Roy. Astron. Soc., **96**, 294 (1926).

[12] Langmuire L. Proc. Nat. Acad., **14**, 627 (1928).

[13] Давыдов Д. Phys. Z. Sow. Union, **9**, 433 (1936).

[14] Druveystein M. Physica, 562 (1938).

[15] Spitser L. Monthly Notices, Roy. Astron. Soc., **100**, 396 (1940).

[16] Cohen R. S., Spitzer L., and Routly P. Phys. Rev., **80**, No. 2, 230 (1950).

[17] Спитцер Л. Физика полностью ионизованного газа. М., ИЛ, 1957.

[18] Cowling T. G. Proc. Roy. Soc., **A 183**, 453 (1945).

[19] Чандрасекар С. Принципы звездной динамики. М., ИЛ, 1948; Astrophys. J., **97**, 255, 263 (1943).

[20] Эбелинг В., Крефт В., Кремп В. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. М., Мир, 1979.

[21] Майоров С. А., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, N 11, 44 (1994).

[22] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., Мир, 1987.

[23] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 8, 47 (1989).

[24] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Письма в ЖТФ,

14, N 4, 354 (1988).

[25] Трубников Б. А. Столкновения частиц в полностью ионизованной плазме. В сб. Вопросы теории плазмы, вып. 1, М., Госатомиздат, 1963, с. 98.

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 2 июля 1997 г.