

УДК 533.9

## РЕКОМБИНАЦИЯ КЛАССИЧЕСКОЙ КУЛОНОВСКОЙ ПЛАЗМЫ НА УПРУГО ОТРАЖАЮЩИХ СТЕНКАХ

А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко

*На основе моделирования из первопринципов и аналитически рассмотрен процесс рекомбинации плазмы с частицами равной массы на упруго отражающих стенках. В рамках томсоновской модели получено выражение для скорости рекомбинации заряженных частиц при столкновениях с упруго отражающими стенками. Результаты численного моделирования динамики многих частиц согласуются с аналитическим рассмотрением.*

*Введение.* Результаты моделирования динамики многих кулоновских частиц привели к выводу, что в классической кулоновской плазме рекомбинационные процессы замораживаются, если на движение заряженных частиц не оказывается внешнее воздействие стохастического характера<sup>1</sup> (см. обзоры [1-5] и цитируемую там литературу). В работе [6] было высказано предположение, что столкновения заряженных частиц с упруго отражающими стенками стимулируют рекомбинацию. Рекомбинация происходит за счет того, что при упругом столкновении одной из частиц со стенкой в поле другой частицы имеет место перераспределение энергии относительного движения частиц в системе центра инерции рассматриваемой пары и энергии их движения как целого в лабораторной системе. Этот эффект пренебрежимо мал, когда массы рекомбинирующих частиц отличаются на несколько порядков, как это имеет место для обычной электрон-ионной плазмы. Он становится заметен при рассмотрении частиц с близкими массами, что характерно для ион-ионной плазмы (подробнее см. [7]).

<sup>1</sup> Речь идет о воздействии, внешнем по отношению к динамическим уравнениям Ньютона, которые управляют движением частиц. Стохастический характер воздействия проявляется в утрате динамической памяти, т.е. потере обратимости движения частиц.

В данной работе проведен анализ механизма рекомбинации системы классических кулоновских частиц на упруго отражающих стенках. Рассматривается система из  $n$  положительно и  $n$  отрицательно заряженных частиц, заключенных в куб с длиной ребра  $a$  и упруго отражающими жесткими стенками (подробнее см. [1, 2]). Длина ребра куба  $a$  бралась такой, чтобы обеспечить задаваемую плотность заряженных частиц:  $N = n/a^3$ . Рассматривается случай равных масс  $m$  всех  $2n$  частиц.

*Тройная рекомбинация в объеме.* Наиболее просто объемная тройная рекомбинация описывается в рамках известной модели Томсона [8, 9]. Согласно Томсону, число актов рекомбинации  $\Gamma_3$  в единицу времени в единице объема определяется произведением вероятности столкновения зарядов в единице объема ( $\sigma\nu N^2 \sim \Lambda(e^2/T)^2(2T/m)^{1/2}N^2$ ) на вероятность  $(e^2/T)^3N$  того, что столкновение имело место на достаточно близком расстоянии  $(e^2/T)$  от третьего заряда, чтобы образовалось достаточно глубокое связанное состояние. Соответственно,  $\Gamma_3 \sim \Lambda(e^2/T)^5(2T/m)^{1/2}N^3$ . Здесь  $T$  – температура плазмы,  $m$  – масса частиц,  $\Lambda = (1/2)\ln(1+9/4\pi\delta)$  – так называемый кулоновский логарифм,  $\delta = 2e^6N/T^3$  – параметр, характеризующий степень идеальности плазмы.

Более подробная теория, основанная на рассмотрении диффузионного движения заряженных частиц по энергетической оси [10 – 15], дает выражение [14, 15], отличающееся лишь численным множителем порядка единицы:  $\Gamma_3 = 4 \cdot 2^{5/2}\pi^{3/2}e^{10}N^3\Lambda/5,004 \times 9m^{1/2}T^{9/2}$ .

Когда изменение числа свободных и связанных частиц определяется только тройной рекомбинацией (в частности, пренебрегается ионизацией), для вероятности  $\eta(t)$  частице находиться в свободном состоянии справедливо уравнение:

$$d\eta/d\tau = -(a_3/2)\eta^3, \quad \eta(0) = 1. \quad (1)$$

Здесь  $\eta(0)$  – доля свободных частиц в начальный момент времени, время  $\tau$  измеряется в ленгмюровских периодах  $T_L = \sqrt{\pi m/e^2 N_0}$ ,  $a_3 \approx 10 \cdot \Lambda[T/(e^2 N_0^{1/3})]^{-9/2} = 3,5 \cdot \Lambda \cdot \delta_0^{3/2}$  – безразмерный коэффициент рекомбинации,  $\delta_0 = 2e^6 N_0/T^3$  – параметр неидеальности для начального момента времени,  $N_0$  – плотность в начальный момент времени. При получении величины  $a_3$  было использовано выражение для скорости рекомбинации, вытекающее из диффузионной теории.

При постоянной температуре решение уравнения (1) имеет вид:  $\eta(\tau) = (1 + a_3\tau)^{-1/2}$ .

*Рекомбинация вблизи стенок.* Основываясь на соображениях, аналогичных томсоновской теории, можно получить число актов рекомбинации  $\Gamma_2$  в единице объема в единицу времени для случая, когда рекомбинация обусловлена перераспределением полной

энергии двух частиц при столкновении одной из них со стенкой в поле другой частицы. Для этого надо умножить вероятность одной из частиц столкнуться со стенкой  $(T/2\pi m)^{1/2} 2N6a^2$  на вероятность  $(1/8)(e^2/T)^3 2N$  того, что после столкновения вблизи окажется частица противоположного знака заряда и тем же направлением скорости. В результате имеем:  $\Gamma_2 \approx (e^2/T)^3 (T/2\pi m)^{1/2} (3/a) N^2$ . Как и в томсоновской модели, здесь предполагается, что когда энергия связи частиц превышает температуру (энергия ниже "горлышка стока"), обратные акты ионизации возбужденных состояний редки по сравнению с актами релаксации "вниз" по энергетической оси.

Когда преобладает стеночная рекомбинация, справедливо уравнение:  $d\eta/d\tau = -a_2\eta^2$ ,  $\eta(0) = 1$ . Здесь  $a_2 \approx 2,1 [T/(e^2 N_0^{1/3})]^{-5/2} / n^{1/3}$  – безразмерный коэффициент стеночной рекомбинации; зависимость вероятности от времени при постоянной температуре имеет вид:  $\eta(\tau) = (1 + a_2\tau)^{-1}$ . Как и в случае томсоновской теории, пренебрежение процессом ионизации справедливо для плазмы, существенно переохлажденной по степени ионизации, т.е. когда степень ионизации много выше равновесной для данной температуры.

Приведенное выше рассмотрение носит, конечно, оценочный характер. Мы полагаем, однако, что как и томсоновская модель, оно дает правильную зависимость скорости рекомбинации от параметров плазмы, а численный коэффициент – с точностью до множителя порядка единицы.

*О применимости классического рассмотрения процесса рекомбинации.* В публикации [16] утверждается, что как рекомбинация, так и ионизация – "квантовые явления и описывать их на классическом языке некорректно". Эта точка зрения не подкреплена никакими соображениями и противоречит основополагающим работам по теории тройной рекомбинации, полностью опирающимся на классические представления [10 – 13]. Дело в том, что даже для электрон-ионной плазмы при низких температурах определяющий вклад в рекомбинацию вносит релаксация по высоковозбужденным связанным состояниям (вблизи так называемого "горлышка стока"), которые можно считать классическими. Этот факт хорошо известен специалистам. В работах [3 – 5] показано, что квантовые эффекты в действительности играют несколько большую роль, чем это было принято считать ранее. Тем не менее ясно, что в случае тяжелых частиц квантовыми эффектами можно пренебречь.

*О соотношении стеночной и объемной рекомбинации.* Из выражений для безразмерных коэффициентов  $a_3, a_2$  видно, что объемная рекомбинация преобладает при достаточно большом числе частиц  $n^{1/3} > 0,2 [T/(e^2 N^{1/3})]^2 / \Lambda$ . Отношение скорости объемной

рекомбинации к скорости стеночной с ростом числа частиц растет довольно медленно, пропорционально кубическому корню<sup>2</sup>.

Напомним однако, что здесь все время речь идет о частицах равной массы. Для случая, когда массы частиц сильно отличаются (в частности, для электрон-ионной плазмы), выражение для коэффициента тройной рекомбинации по порядку величины остается прежним, в то время как коэффициент стеночной рекомбинации уменьшается пропорционально отношению масс заряженных частиц. Дело в том, что при столкновении легкого электрона с бесконечно тяжелой стенкой в поле иона происходит очень малое изменение энергии в системе центра инерции. Нужно много столкновений, чтобы набрать энергию связи порядка температуры. Для электрон-ионной плазмы эффективность стеночного столкновения оказывается того же порядка малости, что и при рекомбинации за счет упругого столкновения электрона с третьей тяжелой частицей [11]. Вопрос о рекомбинации за счет изменения энергии электрона в системе центра инерции при упругом столкновении с бесконечно тяжелой частицей подробно проанализирован нами в [17].

*Рекомбинационный нагрев.* Когда частицы оказываются в связанном состоянии, в поступательные степени свободы выделяется энергия, равная энергии разрыва их связи  $\epsilon^*$ . Исходя из этого, решая совместно уравнение энергетического баланса и баланса числа частиц, можно получить выражения, связывающие плотность  $\eta$ , температуру  $\Theta$  свободных частиц и время  $\tau$ , когда преобладает один из рассмотренных выше типов рекомбинации (подробнее см. [18]):

$$\Theta = 1/\eta + b(1/\eta - 1); \quad (2)$$

$$\tau(\eta) = \frac{1}{c_3} \int_{\eta}^1 \left[ \frac{1}{y} + b \left( \frac{1}{y} - 1 \right) \right]^{9/2} y^{-3} dy \text{ в случае тройной рекомбинации}; \quad (3)$$

$$\tau(\eta) = \frac{1}{c_2} \int_{\eta}^1 \left[ \frac{1}{y} + b \left( \frac{1}{y} - 1 \right) \right]^{5/2} y^{-2} dy \text{ в случае стеночной рекомбинации}. \quad (4)$$

<sup>2</sup>Отметим, что пропорциональность кубическому корню имеет место и для других эффектов, обусловленных конечностью числа рассматриваемых частиц: для распределений мгновенных значений микрополей, термодинамических функций, дебаевского экранирования и т.п. (подробнее см. [2]).

Здесь  $\Theta = T(\tau)/T_0$  – безразмерная температура,  $T_0$  – температура в начальный момент времени,  $c_2 = 2,1[T_0/(e^2 N_0^{1/3})]^{-5/2}/n^{1/3}$ ,  $c_3 = 10\Lambda[T_0/(e^2 N_0^{1/3})]^{-9/2}$  – соответственно безразмерные коэффициенты стеночной и тройной рекомбинации,  $b = 2\epsilon^*/3T_0$  – энергия разрыва связи в единицах  $T_0$ .

*Равновесное распределение.* Изложенное выше справедливо, когда распределение плазмы далеко от равновесного, плазма переохлаждена. Равновесное распределение, как известно, имеет больцмановский вид:  $f_B(y) = Cg(y)\exp(-y)$ . Здесь  $y = \epsilon/T$  – полная энергия частицы,  $g(y)$  – плотность энергетических состояний,  $C$  – нормировочная константа. Для плотности энергетических состояний ниже использовано следующее выражение:

$$g(y > 1,5\delta^{1/3}) = 2(y/\pi)^{1/2}, \quad (5a)$$

$$g(y < 0, |y| > 1,5\delta^{1/3}) = 8\pi^{1/2}Nr_0^3(e^2/Tr_0)^{1/2} \int_0^{x_0} x^2 \sqrt{\frac{G(x)}{x} - |y| \left(\frac{Tr_0}{e^2}\right)} dx, \quad (5b)$$

где  $G(x \geq 1) = 1$ ,  $G(x < 1) = 2,4x - 4x^3 + 3x^4 - 0,4x^6$  – множитель, описывающий отклонение потенциала взаимодействия от кулоновского на малых расстояниях (частицы считаются однородно заряженными проницаемыми сферами малого радиуса  $r_0/2$ );  $x_0$  – корень уравнения  $G(x_0)/x_0 = |y| \left(\frac{Tr_0}{e^2}\right)$ . В промежуточной области  $|y| < 1,5\delta^{1/3}$  использовалась линейная интерполяция между значениями функции в крайних точках  $|y| = 1,5\delta^{1/3}$ .

Для чисто кулоновского поля из (5b) имеем:  $g(y < -1,5\delta^{1/3}) = \pi^{3/2}\delta/4|y|^{5/2}$ . В связи с этим отметим следующее. Выражение для кулоновской плотности состояний в области отрицательных энергий (в котором по сравнению с равновесным максвелл-больцмановским распределением для многих частиц нет экспоненциального фактора) авторы работы [19] сопоставляют со своими численными расчетами двумерной динамики двух частиц равной массы. Как и следовало ожидать, в этом случае они наблюдают хорошее согласие. Однако далее они неправомерно используют это распределение для интерпретации вычислительных экспериментов [1 – 4], проведенных для сотен и тысяч частиц. Более того, утверждается, что факт несовпадения функции типа  $g(y)$  с полным максвелл-больцмановским распределением объясняет вид распределений, полученных в [1 – 4]. Эта же мысль повторена в публикации [16], где утверждается, что результаты моделирования [19] ”находятся в согласии с численными расчетами [4, 7]”. Однако такого согласия в действительности нет: в работе [19] имеет место степенной спад функции

распределения в области отрицательных энергий, в [4, 7] – экспоненциальный. Совокупность пар частиц, вопреки утверждению работы [19], не моделирует ансамбль даже из десятка частиц, не говоря уже о сотнях и тысячах (см. также [20] и Приложение в работе [1]).

*Модель плазмы в потенциальном поле.* Были проведены расчеты динамики многих частиц в той же постановке, что и в работах [1 – 7]. Для того, чтобы снизить возможную роль погрешностей численного счета при отражении частиц от стенок, нами была рассмотрена ситуация, когда система заряженных частиц находится во внешнем потенциальном поле, ограничивающем их движение (потенциальной яме). Выражения для силы, действующей на каждую частицу со стороны этого внешнего поля, имели вид:  $\mathbf{F} = -dU/d\mathbf{r}$ ;  $U(\mathbf{r}) = U_0[(x/x_0)^{2k} + (y/y_0)^{2k} + (z/z_0)^{2k}]$ , где константы  $k$  и  $U_0, x_0, y_0, z_0$  подбирались так, чтобы моделировать стенки различной крутизны при заданной плотности частиц. В приводимых ниже расчетах полагалось:  $U_0 = T_0, x_0 = y_0 = z_0 = a_0$ . При этом  $a_0$  находилось из условия  $n = \int d^3r \exp(-U(\mathbf{r})/T_0)$ . Начальное распределение частиц полагалось больцмановским с потенциалом  $U(\mathbf{r})$ .

Кроме того, была несколько уточнена разностная схема. Ранее при переходе к следующему большому временному шагу (подробнее см. [1 – 5]) прогнозируемые смещения частиц на момент времени, равный половине большого шага, брались равными смещениям от момента половины прошлого большого шага до начала текущего. Если оказывалось, что прогнозируемое смещение направлено навстречу скорости частицы (это возможно вблизи точки поворота частицы), то смещение полагалось равным нулю. В данной работе смещения вычислялись по известным на момент начала шага скоростям частиц и силам, действующим на них. Это повысило точность сохранения полной энергии системы в 5–7 раз при прочих равных условиях.

*Результаты расчетов.* Как показывают результаты расчетов (см. рис. 1), у функции распределения возникает "хвост" в области отрицательных энергий. Его появление имеет место как в случае бесконечно жестких стенок, так и для потенциального поля. Кроме того, расчеты показали, что улучшение точности вычислений несущественно уменьшает количество частиц в области отрицательных энергий. Поэтому мы связываем наблюдаемый рекомбинационный процесс не с возможными численными погрешностями при моделировании движения отражающихся частиц, а с другими причинами. Как и ранее, мы считаем, что поступательные степени свободы хаотизированы за счет небольших погрешностей численного счета. Релаксация же по энергетической оси в области отрицательных энергий в рассматриваемом случае частиц равной мас-

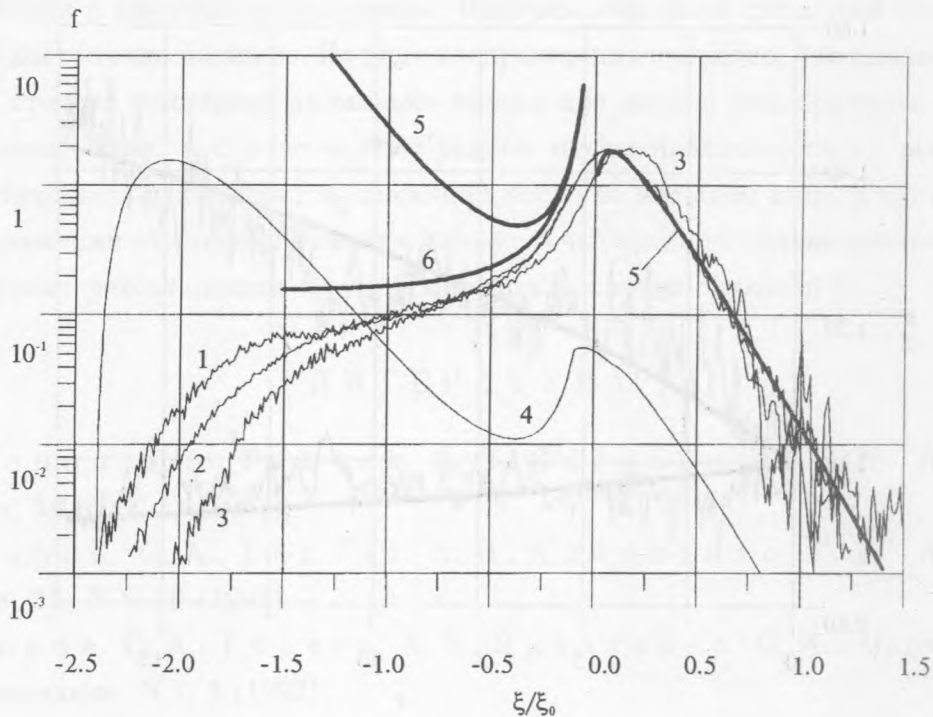


Рис. 1. Функция распределения частиц  $f$  по полной энергии  $\epsilon$  для плазмы частиц с равными массами. Длительность расчетов  $t = 20T_L$ , плотность  $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , начальная температура  $T_0 = 0,1 \text{ эВ}$  и радиус обрезания  $r_0 = 0,05N^{-1/3}$  ( $\epsilon_0 = e^2/r_0$ ), 1 - упруго отражающие стенки; 2 - потенциал, моделирующий крутые стенки,  $k = 10$ ; 3 - потенциал, моделирующий пологие стенки,  $k = 1$ ; 4 - равновесное максвелл-больцмановское распределение, нормированное на единицу; 5 - максвелл-больцмановское распределение (5), нормированное по распределению частиц в континууме (по правой ветви кривой 5); 6 - функция распределения для тройной рекомбинации [14, 15]. Средняя за время расчета температура частиц  $T = 0,2 \text{ эВ}$  одинакова во всех случаях.

сы, на наш взгляд, обусловлена перемешиванием связанных и свободных состояний при столкновении двух частиц в неинерциальной системе координат (либо при столкновениях со стенками, либо во внешнем поле, где основную роль, по-видимому, играют точки поворота).

Сопоставление результатов расчетов с максвелл-больцмановским распределением показывает, что до конца релаксации еще очень далеко. Существенно отличается и форма расчетного и равновесного распределений в квазиконтинууме (вблизи нулевой энергии, где очень важную роль играет коллективное взаимодействие). В частности,

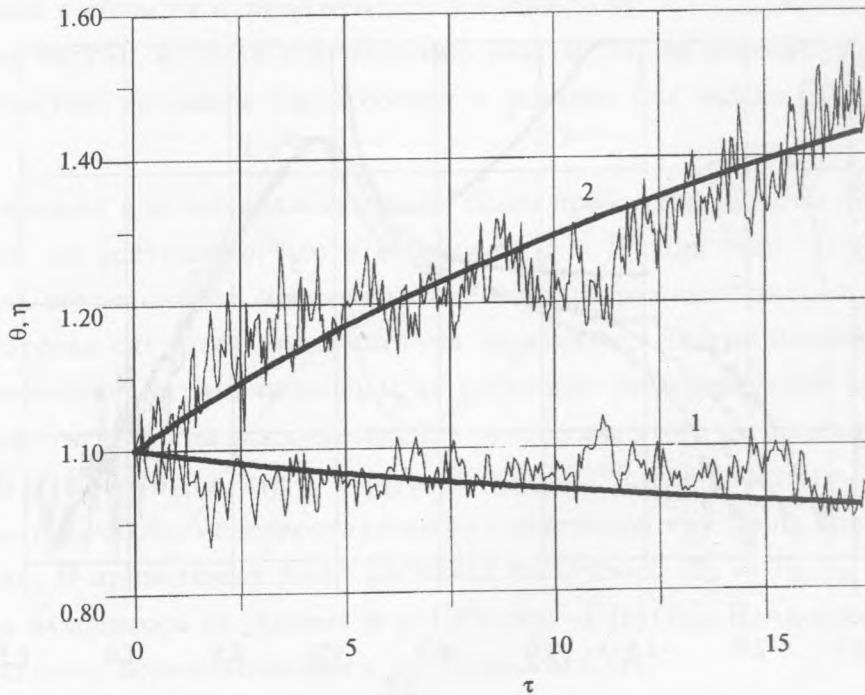


Рис. 2. Временные зависимости для случая упруго отражающих стенок (параметры см. на рис. 1) вероятности нахождения частиц в континууме  $\eta$  (1) и приведенной температуры свободных частиц  $\Theta$  (2). Сплошные кривые – результаты моделирования, жирные кривые – формулы (2), (4), при  $\epsilon^* = 1$  эВ (что примерно соответствует средней энергии связи для функции распределения, полученной при моделировании) и  $c_2 \rightarrow c'_2 = 0,5[T_0/(e^2 N_0^{1/3})]^{-5/2}/n^{1/3}$  (этот коэффициент в 4 раза меньше теоретического значения),  $n = 128$ . В рассматриваемых условиях скорость стеночной рекомбинации более чем в 200 раз превышает скорость тройной рекомбинации.  $\tau = t/T_L$ .

сильно размазан пик, обусловленный расходимостью плотности энергетических состояний вблизи нуля. Рассчитанная функция распределения заметно отличается от той, которая имеет место при тройной рекомбинации.

Сопоставление временной зависимости температуры и плотности числа свободных частиц с аналитическими результатами (2, 3, 4) показывает, что действительно имеет место стеночная рекомбинация (см. рис. 2), хотя и со скоростью в 4 раза меньшей, чем дает простое теоретическое рассмотрение. Мы полагаем, что это отличие может быть обусловлено некоторым замедлением процесса рекомбинации за счет коллективных явлений (см. [1 – 7]). Однако это может быть обусловлено и неточностью числен-



ного множителя в аналитической модели. Впрочем, сам факт стеночной рекомбинации установлен достаточно надежно. Из вида распределения очевидно, что плазма переохлаждена, т.е. степень ионизации аномально высока для данной температуры.

*Заключение.* Итак, в случае частиц равной массы наблюдается их рекомбинация за счет неинерциальных эффектов, имеющих место во внешнем поле, в частности, при упругом отражении от стенок. Отметим, что в случае частиц с сильно различающимися массами эффект рекомбинации на упругих стенках сильно ослаблен [6, 7].

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **34**, N 11, 3 (1991).
- [2] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **35**, N 2, 10 (1992).
- [3] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Математическое моделирование, N 7, 3 (1992).
- [4] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 298 (1994).
- [5] Maurov S. A., Tkachev A. N., Yakovlenko S. I. Physica Scripta, **51**, 498 (1994).
- [6] Майоров С. А., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **37**, N 11, 44 (1994).
- [7] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 33 (1987).
- [8] Thomson J. J. Phil. Mag. **47**, 397 (1924).
- [9] Мак-Даниель И. Процессы столкновений в ионизованных газах. М., Мир, 1967.
- [10] Беляев С. Т., Будкер Г. И. В сб.: Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций. Под ред. М. А. Леонтовича. т. 3, М., Изд-во АН СССР, 1958, с. 41.
- [11] Питаевский Л. П. ЖЭТФ, **42**, 1326 (1962).
- [12] Гуревич А. В. Геофизика и аэрономия, **4**, 3 (1964).
- [13] Гуревич А. В., Питаевский Л. П. ЖЭТФ, **46**, 1281 (1964).
- [14] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 10 (1990).

- [15] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **37**, N 9, 3 (1994).
- [16] Рухадзе А. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 40 (1996).
- [17] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **39**, N 4, 48 (1996).
- [18] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Квантовая электроника, **20**, N 2, 111 (1993).
- [19] Игнатов А. М., Коротченко А. И., Макаров В. П., и др. УФН, **165**, N 1, 113 (1995).
- [20] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **165**, N 1, 117 (1995).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 28 марта 1996 г.