

УДК 533.9

ТРОЙНАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МНОГИХ КУЛОНОВСКИХ ЧАСТИЦ ИЗ ПЕРВОПРИНЦИПОВ

С. И. Яковленко

Проведен анализ величины замедления рекомбинации, имеющего место при моделировании динамики многих кулоновских частиц. Показана несостоятельность недавно опубликованного утверждения, что замедление рекомбинации обусловлено резким ослаблением взаимодействия связанных и свободных электронов и что компьютерное моделирование демонстрирует необходимость радикального пересмотра кинетических моделей тройной рекомбинации. Указано, что задержка рекомбинации происходит за счет компенсации прямых и обратных переходов в энергетическом спектре. Подытожена трактовка этого явления.

Первая модель тройной рекомбинации была предложена Дж. Дж. Томсоном еще в 1924 году [1]. Затем теория тройной рекомбинации развивалась в двух направлениях. Одно основано на рассмотрении процесса диффузионной релаксации электрона по энергетической оси [2 – 5]; другое – на рассмотрении балансных уравнений для заселенностей возбужденных состояний [6]. Теоретический анализ и многочисленные расчеты поуровневой кинетики показали, что в случае низкотемпературной, плотной, высокоионизованной плазмы, когда рекомбинация преобладает над ионизацией (плазма переохлаждена), релаксационный процесс достаточно хорошо описывается диффузионной теорией (см., например, книги [7 – 9]), приводящей практически к тому же выражению для скорости рекомбинации, что и теория Томсона. Эти результаты справедливы в случае температуры много меньшей энергии ионизации, когда движение электронов в узком месте ("горлышке стока") рекомбинации можно считать классическим.

Кинетическая теория тройной рекомбинации вполне устоялась, и не видно оснований для ее радикального пересмотра. С точностью до коэффициента порядка единицы результаты теории согласуются с экспериментальными данными.

В работах, подытоженных в обзорах [10, 11], на основе моделирования динамики многих кулоновских частиц было обнаружено замедление рекомбинации. Оно проявляется не только в уменьшении скорости рекомбинации (и, соответственно, скорости рекомбинационного разогрева электронов), но и в том, что получаемое в расчетах квазистационарное распределение электронов по энергетической оси радикально отличается от того, которое следует из кинетических теорий. Этот эффект был объяснен сохранением энтропии в динамической системе, а наблюдавшаяся в расчетах слабая рекомбинация была связана с нарушением временной симметрии численного решения [10, 11].

Не вдаваясь пока в детали этой трактовки (о них см. [2]), отметим тот важный факт, что справедливость известных кинетических теорий тройной рекомбинации [1 – 9] в работах [10, 11] не ставится под сомнение. В работах [10, 11] показано, что для экспериментального наблюдения обнаруженного эффекта замедления рекомбинации требуются весьма специфические условия, которые трудно реализовать. В обычных же условиях справедливы известные кинетические модели [1 – 9].

Однако в недавней работе [13], на основе численного моделирования, проведенного в той же постановке задачи, что и в [10, 11], сделан вывод о необходимости "пересмотра сложившихся представлений о процессе тройной рекомбинации электронов в классической кулоновской плазме", причем речь идет именно о пересмотре известных кинетических моделей [1 – 9]. По мнению автора [13] эффективность обмена энергией между свободным и связанным электроном существенно меньше, чем предполагается во всех теоретических подходах, и это объясняет отличие результатов, получаемых на основе известных кинетических моделей, от результатов моделирования динамики многих частиц (ДМЧ).

Ниже проведен анализ характера рекомбинации, наблюдающейся при моделировании ДМЧ. Показана несостоятельность той точки зрения, что "задержка рекомбинации связана с резким ослаблением взаимодействия связанных и свободных электронов при больших прицельных параметрах столкновений" [13]. Подтверждена и развита трактовка работ [10 – 12].

О времени рекомбинации, вытекающем из моделирования. То, что слабая рекомбинация при численном моделировании ДМЧ имеет место, отмечалось еще в работах, отраженных в обзорах [10, 11]. Было известно, что время рекомбинации более чем на

порядок превосходит то время, которое следует из кинетических моделей, в частности, очень медленно устанавливается рекомбинационное распределение электронов по энергиям (см., например, рис. 1 в [10]). В работе [14] показано, что ухудшение точности расчета приводит к интенсификации рекомбинации. Наличие слабой рекомбинации было объяснено потерей временной симметрии численного решения динамических уравнений. Эта точка зрения получила подтверждение в более поздних работах [12, 15].

Длительных расчетов, в которых неизбежно имеет место существенная потеря временной симметрии, не проводилось, поскольку скорость рекомбинации в этом случае характеризует не реальный физический процесс, а точность численного решения.

В работе [13] эволюция системы прослежена на существенно более длительных временах, чем ранее. Временная симметрия в этих расчетах потеряна и наблюдаемый релаксационный процесс нельзя уже считать лишь свойством решаемых динамических уравнений. Тем не менее, раз уж такого рода расчеты проведены, представляет интерес более надежно оценить время рекомбинации, определяемое численным решением уравнений ДМЧ. В работе [13] соответствующие оценки сделаны, однако при сопоставлении результатов расчета с кинетическими моделями допущены неточности, приводящие к занижению скорости рекомбинации для известных кинетических моделей на порядок. Поэтому рассмотрим подробно, насколько отличается время рекомбинации, вытекающее из расчетов [13], от времени рекомбинации, вытекающего из кинетических моделей.

Оценка времени рекомбинации в работе [13] сделана на основе изменения во времени числа электронов $n_e(t)$, имеющих к моменту времени t полную энергию меньше данной ϵ (см. рис. 1). Это процедура проведена только для одного расчета с начальными значениями плотности и температуры плазмы: $N_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $T_0 = 0.01 \text{ эВ}$. Эволюция 2000 электронов и 2000 ионов прослеживалась до момента времени $t_f \approx 850\tau_{ei} \approx 10^3/\omega_L$, где $\tau_{ei} = N_e^{-1/3}/(2T_f/m_e) \approx 2.1 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ – время пролета межчастичного расстояния электроном (используемое в [13]); $T_f = 0.03 \text{ эВ}$ – температура электронов в конечный момент времени t_f , $\omega_L = (4\pi e^2 N_e/m_e)^{1/2} \approx 5.6 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ – ленгмюровская частота.

Как показано в [12, 15], на начальной стадии имеет место релаксация за счет динамического перемешивания фазовых траекторий системы на части энергетической поверхности в фазовом (Γ -) пространстве. Эта динамическая релаксация происходит без потери временной симметрии численного решения динамических уравнений. За это время устанавливается метастабильное состояние. Диссипативная же релаксация с потерей временной симметрии происходит на существенно более поздней стадии. Как

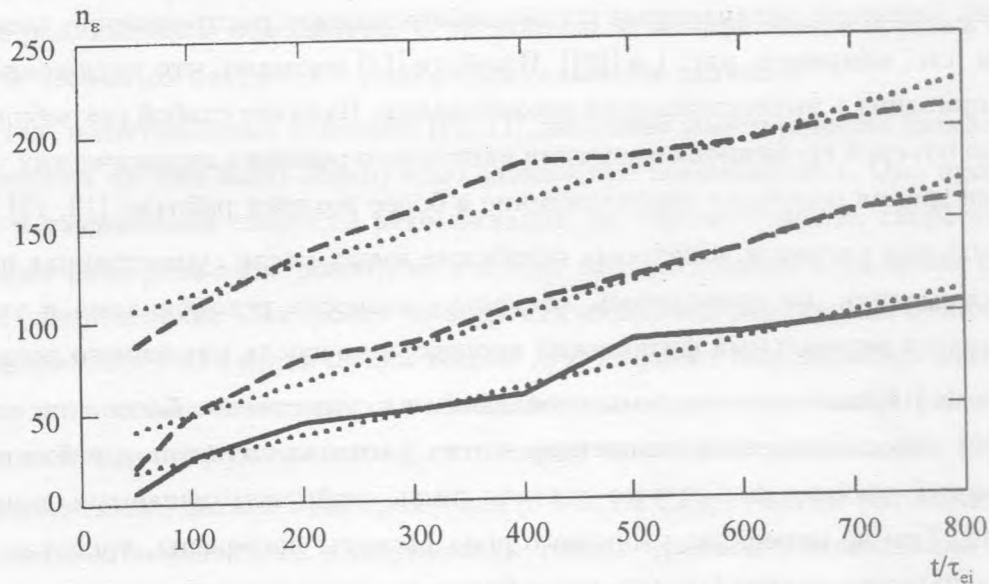


Рис. 1. Зависимость от времени числа электронов, имеющих полную энергию меньше данной ϵ . Штрих-пунктир $\epsilon = -2T_f$, штриховая линия $\epsilon = -4T_f$, сплошная линия $\epsilon = -6T_f$ (по данным работы [13]). Пунктирные прямые соответствуют линейной зависимости (1) с коэффициентами: $a = 0.159/\tau_{ei}$, $n_0 = 98$ для $\epsilon = -2T_f$; $a = 0.174/\tau_{ei}$, $n_0 = 31$ для $\epsilon = -4T_f$; $a = 0.125/\tau_{ei}$, $n_0 = 98$ для $\epsilon = -6T_f$.

показано в работах [12, 15], времена, характеризующие расплывание малой области на энергетической поверхности с начальными размерами, соответствующими погрешности счета, имеют порядок $2\pi\omega_L$. Соответственно, в качестве начального времени рассмотрения диссипативного процесса рекомбинации возьмем достаточно большую величину: $t_{in} = 50\tau_{ei} = 59\omega_L$.

На стадии диссипативной рекомбинации, во временном интервале $t_{in} < t < t_f$, зависимость числа связанных электронов от времени можно аппроксимировать прямой линией:

$$n_\epsilon(t) = n_0 + at. \tag{1}$$

Тогда время рекомбинации $\tau_{DMP} = n/a$ определяется наклоном прямой a , аппроксимирующей временную зависимость $n_\epsilon(t)$.

По данным работы [13] $\tau_{DMP} = 1.3 \cdot 10^4 \tau_{ei}$. Из расчетов коэффициентов регрессии, проведенных в данной работе (см. рис. 1), имеем $a = (0.13 - 0.16)/\tau_{ei}$, и соответственно $\tau_{DMP} = (1.2 - 1.6) \cdot 10^4 \tau_{ei}$, что согласуется с результатами [13]. Различия возникают

при рассмотрении выражений, следующих из кинетических моделей.

Скорость рекомбинации и кулоновский логарифм. Значение скорости рекомбинации, вычисляемое на основе моделирования ДМЧ, надо сопоставить с тем значением, которое дает кинетическая теория [4, 5]:

$$\frac{dN_e}{dt} = -\frac{N_e}{\tau_{rec}}, \quad \text{где} \quad \frac{1}{\tau_{rec}} = \frac{4}{5.004} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2}}{9} \frac{e^{10} \Lambda}{\sqrt{m_e}} \frac{N_e^2}{T_e^{9/2}}. \quad (2)$$

Здесь $\Lambda = (1/2) \ln(1 + 9/4\pi\delta)$ – так называемый кулоновский логарифм, $\delta = 2e^6 N_e / T_e^3$ – параметр, характеризующий степень неидеальности плазмы. Это значение кулоновского логарифма соответствует обрезанию прицельного расстояния на дебаевском радиусе, что справедливо для плазмы с хаотически движущимися частицами. Моделирование ДМЧ показало [16, 17], что это выражение справедливо вплоть до значения $\delta \approx 0.1$, когда $\Lambda \approx 1.2$.

В недавней работе [18] предпринята попытка пересмотреть общее мнение об обрезании кулоновского логарифма на дебаевском радиусе, а именно, сделано утверждение, что кулоновский логарифм надо обрезать на величине порядка среднего межчастичного расстояния ($\sim N_e^{-1/3}$). В работе [19], однако, показано, что этот вывод ошибочен, а моделирование, проведенное в работе [18], неадекватно обычным условиям в плазме.

Отметим, что в работе [13] при сравнении результатов моделирования ДМЧ с выражением, даваемым кинетической теорией, используется еще одно выражение для кулоновского логарифма: $\Lambda = (1/2) \ln(1 + Z^2)$, где Z – заряд рекомбинирующего иона. Это выражение предложено в работе [4], где, тем не менее, ясно оговорено, что оно справедливо лишь при $Z \gg 1$. Поэтому использование этого выражения в работе [13] для случая $Z = 1$ (при этом $\Lambda = 0.35$) привело к занижению скорости рекомбинации в 5 раз. Кроме того, в работе [13] при оценке времени рекомбинации не учтено, что в ходе рекомбинации изменяется температура электронов.

Вообще говоря, для дискретных состояний в качестве верхнего предела обрезания кулоновского логарифма естественно брать прицельное расстояние, при котором передается энергия, равная энергии перехода в ближайшее состояние (см., например, [9]). Однако, если мы хотим выявить разницу между результатами моделирования ДМЧ и кинетическими представлениями, следует использовать одни и те же модели плазмы, как в кинетике, так и в расчетах ДМЧ. Соответственно, при сопоставлении результатов нельзя использовать представления о дискретности уровней для классических частиц.

Скорость рекомбинации с учетом разогрева электронов. Время рекомбинации является резкой функцией температуры электронов. Температура же, хотя и медленно,

но меняется в течение рассматриваемого периода рекомбинационной релаксации. Поэтому нельзя в формулу для τ_{rec} подставлять конечное значение $T_f = 0.03 \text{ эВ}$, как это сделано в работе [13].

В [13] зависимость T_e от времени не приведена. Из наших расчетов с теми же начальными условиями, что и в [13], для момента времени t_{in} она составляет $T_{in} \approx 0.025 \text{ эВ}$. Далее температура линейно растет. Если использовать начальное значение температуры электронов $T_e = T_{in}$, то для него скорость рекомбинации (2) будет в 2.3 раза больше, чем при $T_e = T_f$.

Проведем оценку времени рекомбинации способом, использовавшимся в [16]. Когда частицы оказываются в связанном состоянии, в поступательные степени свободы выделяется энергия, равная энергии разрыва их связи ϵ^* . Решая совместно уравнение энергетического баланса и баланса числа частиц, можно получить следующие выражения для плотности и температуры свободных электронов в энергоизолированной плазме (подробнее см. [20]):

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

$$\tau(\eta) = \int_{\eta}^1 [1 + b(1 - y)]^{9/2} y^{-15/2} dy.$$

Здесь $\eta = N_e(\tau)/N_{in}$, $\Theta = T_e(\tau)/T_{in}$ – безразмерные значения плотности и температуры; $N_{in} = N(t_{in})$, $T_{in} = T_e(t_{in})$ – плотность и температура в начальный момент времени $t = t_{in}$; $\tau = t/\tau_{rec}(T_{in})$ – безразмерное время; $b = 2\epsilon^*/3T_{in}$ – параметр, характеризующий энергию разрыва связи в единицах T_{in} .

В начальной стадии рекомбинации ($\tau \ll 1$) зависимость от времени плотности и температуры линейна:

$$\eta = 1 - \tau, \quad \Theta = 1 + (1 + b)\tau. \quad (3)$$

В этом случае, зная наклоны получаемых при моделировании ДМЧ зависимостей от времени плотности и температуры, можно из (3) найти как время рекомбинации, так и величину энерговыделения:

$$\tau_{DMP}(T_{in}) = n/a; \quad \epsilon^* = \frac{3}{2} \left(\frac{(T_f - T_{in})}{t_f - t_{in}} \tau_{DMP}(T_{in}) - 1 \right).$$

Используем для оценки значение $a = 0.125/\tau_{ei}$, соответствующее более глубоким состояниям, поскольку для них результаты расчетов лучше аппроксимируются прямой линией. Соответственно получаем: $\tau_{DMP}(T_{in})/\tau_{rec}(T_{in}) \approx 70$, $\epsilon^* \approx 5T_{in}$.

Отметим, что для времени рекомбинации здесь использовано выражение (2), полученное в работе [5]. Если же использовать, как это сделано в [13], формулу работы [4], то отличие времени рекомбинации дополнительно увеличится на множитель $5/4$.

Итак, время рекомбинации, следующее из моделирования ДМЧ, примерно в 70 раз больше, чем дает кинетическая теория. При этом образовавшиеся электрон-ионные пары имеют энергию связи, существенно меньшую энергии ионизации из основного состояния: $J = 2.4 \cdot 20e^2 N_e^{1/3} \approx 13T_{in}$.

Разумеется, точность приведенной оценки не очень высока, она примерно соответствует разбросу значений для разных кривых, который составляет около 40%. Однако эта оценка подтверждается и другими данными. В расчетах [13], как и в более ранних [10, 11], имеет место не только замедление скорости рекомбинации, но и большая задержка формирования рекомбинационного распределения. Согласно рис. 2 работы [13] к моменту времени $t \approx 200\tau_{ei}$ рекомбинационное распределение еще не установилось. Это время намного превосходит характерное время установления рекомбинационного распределения, вытекающее из кинетических моделей [10, 11, 21]:

$$\tau_e = (3\sqrt{m_e T_e^{3/2}})/(4\sqrt{2\pi}e^4 \Lambda N_e).$$

Полагая, что рекомбинационное распределение устанавливается к моменту времени $t = 300\tau_{ei}$, получаем: $300\tau_{ei}/\tau_e \approx 80$.

Итак, в расчетах ДМЧ время формирования рекомбинационного распределения оказывается примерно во столько же раз больше, чем это следует из кинетической теории, во сколько раз оказывается больше время рекомбинации.

О близких и дальних пролетах. Как уже отмечалось, в работе [13] из различия результатов моделирования ДМЧ и предсказания кинетической теории сделан вывод о необходимости пересмотра известных кинетических моделей [1 – 9]. Для обоснования этого утверждения в работе [13] приведены результаты численных расчетов, моделирующих столкновение свободного электрона с сильно связанной электрон-ионной парой. Точнее, столкновения моделируются в условиях, когда прицельный параметр свободного электрона много больше орбиты связанного электрона. Из того факта, что эффективность передачи энергии в этом случае экспоненциально мала, в работе [13] сделан вывод, что используемые в принятых теориях [1 – 9] кинетические коэффициенты, определяющие обмен энергией свободных и связанных электронов, завышены во столько раз, во сколько кинетические времена рекомбинации отличаются от времен, определяемых на основе расчетов ДМЧ.

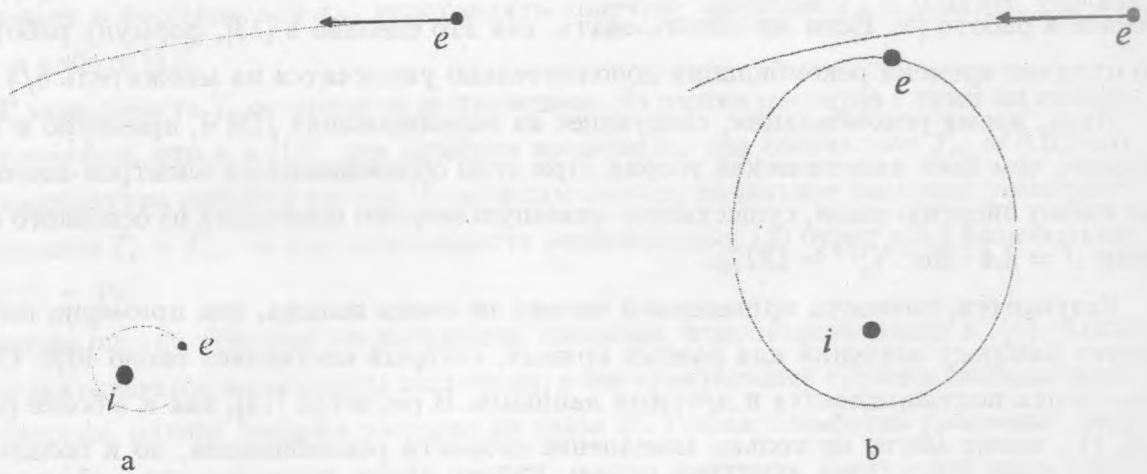


Рис. 2. Геометрия столкновения, соответствующая моделированию столкновения в работе [13] (а), и имеющая место при низкотемпературной тройной рекомбинации (б).

Такой вывод несостоятелен.

Хорошо известно, что при низкотемпературной тройной рекомбинации определяющую роль в формировании рекомбинационного потока играют столкновения с прицельным параметром не много большим, а порядка радиуса орбиты связанного электрона. Здесь имеет место не столкновение электрона с быстро осциллирующим диполем, фактически промоделированное в [13], а обратная ситуация, когда сталкиваются электроны в поле иона (см. рис. 2). Эффект экспоненциальной (адиабатической) малости передачи энергии при больших пролетных временах также хорошо известен в теории атомных столкновений (наиболее простое его изложение см. в книгах [22, 23]). Однако в силу указанных выше причин он не меняет эффективности столкновений, дающих основной вклад в рекомбинационную релаксацию.

Во всяком случае, вопрос о сечениях переходов при столкновении высоковозбужденных электронов со свободными изучен достаточно подробно и нет сомнений, что эти электрон-электронные столкновения хорошо описываются кулоновскими сечениями, используемыми в теории низкотемпературной тройной рекомбинации.

Компенсация прямых и обратных переходов. Можно было бы предположить, что энергообмен между свободными и связанными электронами затруднен по каким-либо другим причинам. Однако при этом не удастся объяснить вид функции распределения, получаемой при моделировании ДМЧ. Если бы по мере перехода к более сильно

связанным электронам имело место резкое уменьшение эффективности столкновений, то должно было бы наблюдаться увеличение, а не падение функции распределения, наблюдаемое в расчетах (подробнее см. [12]).

Более того, в работе [12] представлены непосредственные расчеты числа переходов между различными энергетическими состояниями. Показано, что имеет место практически полная компенсация числа прямых и обратных переходов практически между всеми энергетическими состояниями, в том числе лежащими выше и ниже горлышка стока рекомбинации. При этом скорость переходов в связанных состояниях слабо отличается от скорости переходов в свободных состояниях при близких по модулю полных энергиях.

Иначе говоря, не наблюдается малости скорости переходов по энергетической оси по сравнению со значениями, даваемыми кинетической теорией. Дело в том, что переходы "вниз" по энергии компенсируются не дальнейшими переходами "вниз", а переходами "вверх". Т.е. имеет место метастабильное состояние с распределением по полной энергии, радикально отличающимся от больцмановского.

О трактовке результатов моделирования. Результаты моделирования объясняются следующим образом (см. также [10 – 12]). Надо осознать, что область фазового (Γ -) пространства, отвечающая связанным состояниям электронов, является недоступной для фазовых траекторий системы, начинающихся из той области фазового пространства, которая отвечает свободным состояниям электронов. В рамках такой трактовки все электроны метастабильного состояния, в том числе и оказавшиеся в области отрицательных энергий далеко от границы континуума ($\epsilon < -T_e$), не являются на самом деле связанными электронами. Они попадают в эту энергетическую область на сравнительно короткий промежуток времени за счет флуктуации коллективного микрополя. "Настоящие" связанные электроны образуются за счет потери временной симметрии численного решения на более поздних стадиях эволюции системы частиц.

Запрет на образование долгоживущих связанных состояний при релаксации без потери временной симметрии накладывает закон сохранения энтропии в динамической системе. Прорекомбинировавшей и непрорекомбинировавшей системе кулоновских частиц отвечают существенно разные значения энтропии. При эволюции же системы по чисто динамическим законам энтропия сохраняется (см., например, [24, 25]). Если система достаточно точно следует динамическим законам, то рекомбинации не должно быть. Иначе говоря, уравнения динамики запрещают фазовый переход плазма-газ. Он происходит в той мере, в которой по тем или иным причинам нарушается временная

симметрия.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Tomson J. J. Phil. Mag., **47**, 337 (1924).
- [2] Беляев С. Т., Будкер Г. И. В сб. Физика плазмы и проблемы управляемых термоядерных реакций, 3, Изд. АН СССР, 1958, с. 41.
- [3] Питаевский Л. П. ЖЭТФ, **42**, 1326 (1962).
- [4] Гуревич А. В., Питаевский Л. П. ЖЭТФ, **46**, N 4, 1281 (1964).
- [5] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 10 (1990).
- [6] Bates D. R., Kingston A. E., McWirtter R. W. P. Proc. Roy. Soc., **A267**, 297 (1967).
- [7] Гудзенко Л. И., Яковленко С. И. Плазменные лазеры. М., Атомиздат, 1978.
- [8] Биберман Л. М., Воробьев В. С., Якубов И. Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М., Наука, 1982.
- [9] Держиев В. И., Жидков А. Г., Яковленко С. И. Излучение ионов в неравновесной плотной плазме. М., Энергоатомиздат, 1986.
- [10] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 298 (1994).
- [11] Mayorov S. A., Tkachev A. N., Yakovlenko S. I. Physica Scripta, **51**, 498 (1995).
- [12] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **41**(1), 47 (1998).
- [13] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5-6, 10 (1997).
- [14] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **35**, N 11, 76 (1992).
- [15] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ДАН, **359**(6), 765 (1998).
- [16] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 8, 47 (1989).
- [17] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **35**(2), 10 (1992).
- [18] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9-10, 99 (1997).
- [19] Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 30 (1998).

- [20] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Квантовая электроника, **20**, N 2, 111 (1993).
- [21] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **37**, N 9, 3 (1994).
- [22] Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М., Наука, 1965.
- [23] Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., Наука, 1966.
- [24] Мауер J., Гоеррерт-Мауер V. Statistical Mechanics. Second edition. J. Wiley & Sons, NY 1977.
- [25] Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.) Введение в квантовую статистическую механику. М., Наука, 1984.

Поступила в редакцию 3 ноября 1998 г.