

ИЗ ТЕКУЩЕЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Метастабильная переохлажденная плазма

С.А. Майоров, А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Обзор работ, в которых на основе моделирования из первопринципов и путем аналитического рассмотрения обнаружены неэргодические свойства классической кулоновской плазмы. Моделирование из первопринципов динамики системы многих классических кулоновских частиц показало, что возможно существование плазмы метастабильной и переохлажденной по степени ионизации. Это состояние является следствием сохранения энтропии в гамильтоновых системах, не подвергающихся внешней стохастизации. Оно, по-видимому, аналогично состоянию переохлажденного пара или перегретой жидкости. Для существования метастабильной переохлажденной плазмы необходимо, чтобы кулоновские частицы хорошо следовали законам классической механики (отрицательные ионы должны быть тяжелыми), а степень ионизации должна быть достаточно высокой ($\alpha > 10^{-3}$). Рассмотрение термодинамических характеристик показывает, что смесь метастабильной переохлажденной плазмы с идеальным газом может формировать плазмод с упругими свойствами.

PACS numbers: 52.20.—j, 52.25.Jm

Содержание

1. Введение (297).
 2. Тройная рекомбинация и распределение электронов по энергии (298).
 - 2.1. Коэффициент рекомбинации. 2.2. Распределение по энергии при отказе от принципа детального равновесия.
 3. Моделирование кулоновской плазмы методом динамики многих частиц (299).
 - 3.1. Стохастически изолированная плазма. 3.2. Внешние стохастические воздействия.
 4. Некоторые результаты ДМЧ-расчетов (301).
 - 4.1. Квазистационарное состояние. 4.2. Аномальный дрейф в область положительных энергий. 4.3. О соотношении с принятой точкой зрения. 4.4. Столкновения с атомами и микрополевой дрейф.
 5. Роль квантовых эффектов (304).
 - 5.1. Кинетический барьер. 5.2. Тройная рекомбинация в $e-i-i$ и $i-i$ -плазме.
 6. Термодинамика метастабильной плазмы в смеси с идеальным газом (305).
 - 6.1. Термодинамические параметры. 6.2. Уравнение состояния и изотермы. 6.3. Характеристики адиабатических процессов.
 7. Заключение (307).
- Список литературы (307).

1. Введение

В работах [1—5] методом динамики многих частиц (ДМЧ-методом), т.е. на основе численного решения динамических уравнений для многих взаимодействующих классических частиц (электронов и ионов), исследовалась функция распределения электронов по энергиям. Было показано, что в результате эволюции системы кулоновских частиц устанавливается квазистационарное распределение, радикально отличающееся как от равновесного, больцмановского распределения, так и от распределения, характерного для процесса рекомбинации. Кроме того, оставались неизменными во времени плотность и температура свободных электронов. В то же время распределение по кинетическим энергиям было максвелловским (что и позволяло ввести температуру электронов).

Релаксация функции распределения по энергии к виду, получаемому на основе традиционной кинетической теории, содержащей в себе принцип детального равновесия, имела место только в тех случаях, когда система классических кулоновских частиц подвергалась специально дополнительному внешнему (по отношению к описывающим движение частиц динамическим уравнениям) воздействию стохастического характера [1, 3—5].

Получить аналитическое выражение для функции распределения по энергиям в плазме, изолированной от внешних стохастических воздействий, удалось [1] лишь ценой отказа от принципа детального равновесия. Полученная функция распределения не только согласуется с результатами ДМЧ-моделирования, но и приводит к выражениям для термодинамических величин [6, 7], совпадающим с результатами дебаевской теории в

С.А. Майоров, А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко. Институт общей физики РАН, 117942, Москва, ул. Вавилова, 38
Тел. (095) 132-82-80

Статья поступила 11 ноября 1993 г.,
после доработки 30 ноября 1993 г.

области ее применимости (для идеальной плазмы). В то же время было показано, что на основе традиционного подхода (используя принцип детального равновесия) объяснить результаты ДМЧ-расчетов не представляется возможным [1,8].

Таким образом, результаты компьютерного моделирования привели к необходимости пересмотра одного из основных положений статистической механики и физической кинетики, часто принимаемого без должного обоснования. Речь идет о законе возрастания энтропии в его ныне принятой формулировке. Обычно считается, что энтропия системы многих взаимодействующих друг с другом частиц даже в отсутствие внешнего стохастического воздействия должна возрастать, пока не достигнет максимального значения, соответствующего микроканоническому распределению.

Один из основных выводов работ [1—5] состоит в том, что рост энтропии системы классических кулоновских частиц может быть связан лишь с внешним (по отношению к динамическим уравнениям движения частиц) стохастическим воздействием. Этот вывод вполне согласуется с известной теоремой о сохранении энтропии в гамильтоновой системе. Эта теорема обычно трактуется как парадокс [9, 10]. Однако, на наш взгляд, логичнее считать эту теорему не парадоксом, а законом сохранения энтропии в гамильтоновой системе. При этом, конечно, следует помнить, что для обычных макроскопических объектов, с которыми приходится встречаться на практике (в особенности, для газов), достаточно очень слабого внешнего стохастического воздействия, чтобы система не описывалась гамильтоновыми уравнениями и реализовалась ее релаксация к микроканоническому распределению (подробнее см. [4, 5, 11, 12]).

Однако, в принципе, возможны макроскопические системы, требующие достаточно сильного внешнего стохастического воздействия, для стимулирования релаксации к термодинамическому равновесию. Примером такого устойчивого по отношению к стохастическому воздействию макроскопического объекта является, как показывают ДМЧ-расчеты, система классических кулоновских частиц, т.е. классическая кулоновская плазма, переохлажденная по степени ионизации¹.

Как показано в работах [2, 4—7], переохлажденная метастабильная плазма может, в принципе, существовать аномально долго и обладать (в смеси с электронейтральным газом) упругими свойствами. Для экспериментального наблюдения долгоживущего плазменного образования надо создать высокоионизованную ионную плазму, в которой подавляющая часть электронов прилипла к электроотрицательным тяжелым частицам [17]. Большая стабильность отрицательного иона может, в принципе, иметь место, если он оказывается в центре кластера, например, для сольватированного иона.

Сформулированные выше основные положения работ [1—8] излагаются далее несколько подробнее.

¹ Отметим, что обычно переохлажденная плазма рекомбинирует и это, в частности, используется для создания плазменных лазеров (см., например, [13—16]). Здесь речь идет о возможности существования метастабильного состояния такой плазмы, подобного метастабильному состоянию переохлажденного пара или перегретой жидкости.

2. Тройная рекомбинация и распределение электронов по энергии

2.1. Коэффициент рекомбинации

При описании процесса рекомбинации полностью ионизованной кулоновской плазмы для функции распределения электронов $f(\varepsilon)$ по полной энергии ε обычно используют уравнение Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial \Gamma}{\partial \varepsilon},$$

$$\Gamma = Af - \frac{\partial Bf}{\partial \varepsilon} = \tilde{A}f - B\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}.$$

Здесь $A = \lim_{\tau \rightarrow 0} (\overline{\Delta \varepsilon} / \tau)$, $B = \lim_{\tau \rightarrow 0} (\overline{\Delta \varepsilon^2} / 2\tau)$ — коэффициенты, характеризующие подвижность и диффузию по энергетической оси, $\tilde{A} = A - \partial B / \partial \varepsilon$ — модифицированный коэффициент подвижности; Γ — поток по энергетической оси (при рекомбинации $\Gamma < 0$).

Далее используют традиционное представление о парных кулоновских столкновениях электронов, а возникающие при этом расходящиеся выражения для кинетических сечений, как обычно, обрезают на прицельном расстоянии порядка дебаевского радиуса. В результате можно получить "столкновительный" коэффициент диффузии [1, 4, 8, 18, 19], а затем (решив диффузионное уравнение в квазистационарном приближении при $\varepsilon \rightarrow -0$) определить величину рекомбинационного потока

$$\Gamma = -\frac{4}{5,004} \frac{2^{5/2} \pi^{3/2}}{9m^{1/2}} \frac{e^{10} N_e^2 A}{T_e^{9/2}},$$

где $A = (1/2) \ln[1 + (9/4\pi\delta)]$ — так называемый кулоновский логарифм, возникающий в результате упомянутого обрезания расходящихся сечений, $\delta = 2e^6 N_e / T_e^3$ — параметр, характеризующий идеальность плазмы, $N_i = N_e$ — плотность ионов и электронов.

При этом для функции распределения электронов по энергиям в области отрицательных значений $\varepsilon < 0$ имеет место выражение [1, 4, 5]:

$$f(\varepsilon) = f_B(\varepsilon) [1 - \xi(|\varepsilon| T_e^{-1})]. \quad (1)$$

Здесь

$$\xi(x) = \int_0^x \frac{z^{3/2} \exp(-z)}{\chi(z)} dz \left[\int_0^\infty \frac{z^{3/2} \exp(-z)}{\chi(z)} dz \right]^{-1} =$$

$$= \begin{cases} 0,06013x^{5/2} (1 + \frac{10x}{7}), & x \ll 1, \\ 1 - 0,06661x^3 \exp(-x), & x \gg 1 \end{cases}$$

— величина, характеризующая вероятность того, что электрон, оказавшийся в состоянии с энергией связи $|\varepsilon|$, далее прорекомбинирует (совершит переход $\varepsilon \rightarrow -\infty$);

$$f_B(\varepsilon) = g(\varepsilon) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T_e}\right)$$

— бoльцмановское распределение, T_e — температура электронов;

$$g(\varepsilon) = \int \delta \left(\varepsilon - \frac{mv^2}{2} + \sum \frac{e^2}{r} \right) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{v}_1 =$$

$$= \frac{\text{const}}{T_e} \cdot \begin{cases} \frac{2}{\pi^{1/2}} \left(\frac{\varepsilon}{T_e} \right)^{1/2}, & \varepsilon \gg e^2 N_i^{1/3}, \\ \frac{\pi^{3/2}}{4} \delta \left| \frac{\varepsilon}{T_e} \right|^{-5/2}, & \varepsilon < 0, |\varepsilon| \gg e_i^2 N_i^{1/3} \end{cases}$$

— энергетическая плотность состояний (интегрирование ведется по координате \mathbf{r}_1 и скорости \mathbf{v}_1 пробного электрона).

Часто вводят коэффициент тройной рекомбинации β , для которого справедлив известный "закон девять вторых" (скорость рекомбинации обратно пропорциональна температуре электронов в степени девять вторых):

$$|\Gamma| = \beta(T_e) N_e^2, \quad \beta = C_\beta \cdot 10^{-27} T_e^{-9/2}, \quad C_\beta \cong 7, 3A$$

(Γ в с^{-1} , T_e — в эВ, N_e — в см^{-3}). С точностью до значения коэффициента C_β "закон девять вторых" следует и из теории тройной рекомбинации Томсона. Согласно Томсону, умножая частоту кулоновских столкновений $\langle \sigma_c v \rangle N_e \sim (e^2/T_e)^2 (T_e/m_e)^{1/2} N_e$ на вероятность $(e^2/T_e)^3 N_i$ столкновения при достаточно близком расстоянии (e^2/T_e) от иона (чтобы образовалось глубокое связанное состояние), приходим к выражению для рекомбинационного потока, "буквенно" совпадающему с получаемым из диффузионной теории.

Время рекомбинации можно записать в виде

$$\tau_{\text{рек}} = |\Gamma|^{-1} = (\beta N_e^2)^{-1} = 1, 3\delta^{-5/3} A^{-1} \tau_{ei},$$

где $\tau_{ei} = N_i^{1/3} (m_e/2T_e)^{1/2}$ — время пролета электроном среднего межоионного расстояния. Как показано в работах [1, 2], величина τ_{ei} определяет время установления дебаевского экранирования и энергии кулоновского взаимодействия электронов. Это характерное время, естественно, не возникает в рамках традиционного рассмотрения кинетических задач, основанного на оборванной боголюбовской цепочке.

2.2. Распределение по энергии при отказе от принципа детального равновесия

Отказавшись от закона возрастания энтропии и, соответственно, от принципа детального равновесия, можно вывести из общих соображений некоторые свойства распределения электронов [6], ранее полученные в численных расчетах [1].

Исходя из закона сохранения энтропии, следует положить $\Gamma = 0$. Отсюда следует выражение для функции распределения:

$$f(\varepsilon) = C \exp \int_0^\varepsilon \frac{\tilde{A}(\varepsilon')}{B(\varepsilon')} d\varepsilon'.$$

Для того чтобы функция распределения была нормируема, необходимо выполнение условий:

$$f(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon \rightarrow -\infty} \rightarrow 0, \quad f(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon \rightarrow \infty} \rightarrow 0,$$

и это накладывает соответствующие требования на отношение коэффициентов диффузии и подвижности:

$$\int_0^\varepsilon \frac{\tilde{A}(\varepsilon')}{B(\varepsilon')} d\varepsilon' \Big|_{\varepsilon \rightarrow \pm\infty} \rightarrow -\infty.$$

Отсюда следует, в частности, что это отношение должно быть положительным при достаточно большой по модулю отрицательной полной энергии частицы и отрицательным при большой положительной энергии.

Отметим, что указанные следствия закона сохранения энтропии, как и следовало ожидать, прямо противоречат принципу детального равновесия, обычно закладываемому в исходное уравнение Фоккера–Планка. Принцип детального равновесия накладывает связь на коэффициенты диффузии и подвижности по энергетической оси:

$$\tilde{A}(\varepsilon) f_B(\varepsilon) = B(\varepsilon) \frac{df_B}{d\varepsilon} \quad \text{или} \quad A(\varepsilon) f_B(\varepsilon) = \frac{dB(\varepsilon) f_B}{d\varepsilon}.$$

В этом случае при равном нулю потоке, $\Gamma = 0$, функция распределения является бoльцмановской. Если исходить из обычно принятых "квазибинарных" представлений и использовать столкновительные коэффициенты уравнения Фоккера–Планка, полученные на основе обрезанных кулоновских сечений, то принцип детального равновесия выполняется автоматически.

Однако традиционная процедура получения коэффициентов диффузии и подвижности в отрицательной области энергий не является строго оправданной. Дело в том, что цепь рассуждений, приводящих от уравнений механики к уравнению Фоккера–Планка прослежена лишь для положительных энергий. При рассмотрении положительных энергий из цепочки Боголюбова следует уравнение Больцмана–Власова. Рассматривая далее ситуацию, когда столкновениями неравновесных частиц друг с другом можно пренебречь, и, взяв интеграл столкновений в форме Ландау, можно получить исходное диффузионное уравнение со столкновительными коэффициентами. Для отрицательных же энергий и для области неидеальности $|\varepsilon| < e^2 N_e^{1/3}$ выражения для коэффициентов диффузии и подвижности могут оказаться существенно другими, в частности, удовлетворяющими условиям, приведенным выше.

3. Моделирование кулоновской плазмы методом динамики многих частиц

3.1. Стохастически изолированная плазма

Под стохастически изолированной плазмой мы понимаем совокупность кулоновских частиц, эволюционирующую только по законам динамики, в отличие от ситуации, когда на систему оказывается какое-либо стохастическое воздействие, нарушающее динамическую память. Стохастически изолированная плазма, разумеется, — идеализированное понятие, поскольку полностью изолированных систем не бывает как в природе, так и при численном моделировании. Тем не менее сопоставление свойств стохастически изолированной системы с результатами специально организованного внешнего недетерминированного воздействия дает возможность исследовать достаточно тонкие свойства классической кулоновской плазмы.

3.1.1. О методе частиц. Метод частиц [20] состоит в численном решении уравнений движения (уравнений Ньютона) для системы частиц, взаимодействующих между собой и со стенками. При рассмотрении частиц с короткодействующими силами принято сохранять старое название — метод молекулярной динамики. Когда рассматривается взаимодействие многих частиц с далекодействующей кулоновской составляющей, мы обычно употребляем термин — метод динамики многих частиц или ДМЧ-метод.

Метод частиц опирается на идеологию моделирования из первопринципов. На наш взгляд, он весьма плодотворен при исследовании фундаментальных свойств системы многих частиц. Однако развитие этого метода шло, в основном, по пути создания модификаций, направленных на решение прикладных задач и преследующих цель путем различных упрощений эффективно описать свойства систем с как можно большим числом частиц. При этом, обычно применяемые упрощения (сглаживание воздействия от удаленных частиц или навязывание плазме периодических граничных условий) приводят к существенному отходу от исходных динамических уравнений. Этого нельзя допускать при исследовании фундаментальных свойств кулоновской плазмы, в частности, при рассмотрении вопроса о том, как внешняя стохастизация приводит к потере системой кулоновских частиц "динамической памяти" (подробнее см. [1]).

В связи с этим нами был предложен и реализован алгоритм решения уравнений динамики многих кулоновских частиц, который требует не слишком быстрого увеличения числа операций с ростом числа частиц. Основная идея метода состоит в более точном расчете изменения во времени сил взаимодействия между ближайшими соседями. Это позволило провести много расчетов и обнаружить неожиданные свойства системы классических кулоновских частиц [1—5].

3.1.2. Система уравнений. Рассматривалась временная эволюция полностью ионизованной плазмы, заключенной в куб со стенками, ограничивающими движение частиц. Траектории n положительно и zn отрицательно заряженных частиц (электронов) определялись путем численного решения уравнений Ньютона:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_k}{m_k}, \quad \mathbf{F}_k = \sum_{l \neq k}^{(z+1)n} \mathbf{f}_{kl}, \quad k = 1, 2, \dots, (z+1)n,$$

$$\mathbf{f}_{kl} = \begin{cases} \frac{q_k q_l (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|^3}, & |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| \geq r_0, \\ \frac{q_k q_l (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)}{r_0^3} G\left(\frac{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|}{r_0}\right), & |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| \leq r_0. \end{cases}$$

Здесь $\mathbf{r}_k(t) = \{x_k(t), y_k(t), z_k(t)\}$ — радиус-вектор k -й частицы, m_k — ее масса (брались массы электронов и ядер с порядковым номером z), q_k — заряд частицы ($|q_k| = e$ для электрона, $q_k = ze$ для иона), $G(x) = 8 - 9x + 2x^3$ — сглаживающая функция, обеспечивающая непрерывность и гладкость силы при $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| = r_0$, она описывает взаимодействие однородно заряженных взаимно проникаемых сфер диаметром r_0 . Длина ребра куба a выбиралась такой, чтобы обеспечить нужную плотность электронов $N_e = zn/a^3$ и ионов $N_i = n/a^3$ плазмы, при этом полная плотность частиц равна $(z+1)n/a^3$. В приводимых здесь результатах размер r_0 выбирался достаточно малым, чтобы не влиять на

результаты расчетов (это проверялось расчетами с разными значениями r_0).

Первые расчеты мы проводили с небольшим числом частиц $2n = 54$. В настоящее время в отдельных вариантах рассматривается до $2n = 8000$ частиц. В этом диапазоне значений n какой-либо существенной для физики рассматриваемых явлений зависимости средних по времени величин от n не наблюдалось. Поэтому наибольшее количество расчетов проведено для $2n = 1024$.

3.1.3. Начальные условия. В начальный момент времени $t = 0$ координаты и скорости частиц задавались с помощью генератора псевдослучайных чисел: в большинстве случаев координаты и направления скоростей — в соответствии с однородным распределением; модули скоростей — в соответствии с максвелловским распределением для некоторой начальной температуры T_0 . При этом проводилась нормировка начальных скоростей ионов и электронов так, чтобы средняя кинетическая энергия, приходящаяся на частицу для движения в каждом из трех пространственных направлений была равна $T_0/2$.

В различных тестовых расчетах использовались другие модификации начальных условий, например, координаты выбирались в некоторой части куба; электроны помещались непосредственно на ядрах; направления движения выбирались одинаковыми для всех частиц; брались моноэнергетическое распределение.

3.1.4. Граничные условия. При рассмотрении стохастически изолированной плазмы стенки считались зеркально отражающими. Граничные условия реализовывались следующим образом: если частица на каком-либо внешнем временном шаге выходит за стенку куба, то знак у нормальной к стенке компоненты скорости меняется на обратный. Отметим, что часто используемые в молекулярно-динамических расчетах и более удобные с вычислительной точки зрения периодические граничные условия не подходят для наших целей — эти условия нельзя использовать при исследовании фундаментальных свойств плазмы (более подробное обсуждение см. в [1]).

3.1.5. О методе численного решения. Были опробованы самые различные стандартные методы решения динамических уравнений: схема с перешагиванием; методы Эйлера, Верлета, Рунге–Кутты. Существенный прогресс в выполнении громадного объема вычислений связан с созданием оригинального метода, основанного на выделении у каждой частицы ближайших соседей и более точном учете сил, действующих со стороны них. Разработанный метод позволил сократить объем вычислений по сравнению со стандартными методами в несколько десятков раз. При этом он не вносит дополнительных неконтролируемых погрешностей, меняющих физические свойства системы. Опишем в общих чертах применявшийся алгоритм.

Пусть в начальный момент времени t_0 известны все координаты $\mathbf{r}_k(t_0)$ и скорости $\mathbf{v}_k(t_0)$ частиц. Процедура определения величин $\mathbf{r}_k(t_0 + \Delta t)$ и $\mathbf{v}_k(t_0 + \Delta t)$, где Δt — внешний шаг по времени, состоит в следующем.

Рассчитываются значения координат $\mathbf{r}_k^{(0)}(t_0 + (\Delta t/2))$, соответствующие прямолинейному движению частиц. Затем вычисляются значения сил, действующих на частицы. При вычислении силы с целью сокращения объема вычислений учитывается третий закон Ньютона: $\mathbf{f}_{kl} = -\mathbf{f}_{lk}$. Потом у каждой частицы определяются два

ближайших соседа из частиц каждого знака и расстояние до этих ближайших соседей.

Сила, действующая на каждую частицу, вычисляется в виде суммы двух сил: первая обусловлена взаимодействием с ближайшими соседями данной частицы и теми частицами, для которых данная является ближайшим соседом, а вторая — взаимодействием со всеми остальными частицами.

Далее проводится интегрирование уравнений Ньютона по схеме Рунге–Кутты четвертого порядка точности с шагом $\tau = \Delta t/N_\tau$, где N_τ — число внутренних шагов. В ходе интегрирования переменным считается лишь взаимодействие с ближайшими частицами. После расчета значений $\mathbf{r}_k(t_0 + \Delta t)$ и $\mathbf{v}_k(t_0 + \Delta t)$ проверяется условие выхода частиц за границы куба. С вышедшими за границы куба частицами производятся процедуры, соответствующие поставленным граничным условиям.

3.2. Внешние стохастические воздействия

Рассматривалось несколько видов воздействий, делающих недетерминированным движение частиц плазмы: стохастизация за счет погрешностей численного метода; воздействие "шероховатых" стенок; воздействие "термостатирующих" стенок; перестановочная стохастизация; стохастизация неупругими столкновениями.

1) Погрешности численного счета. Контроль точности вычислений осуществлялся, в основном, по погрешности в полной энергии системы. В некоторых случаях на "хвосте" распределения электронов в области отрицательных полных энергий возникали заметные отклонения, не вносящие большого вклада в полную энергию системы и обусловленные, по-видимому, эффектами, связанными с отражением частиц от стенок. Роль погрешностей счета выявлялась путем сопоставления расчетов с разными шагами по времени и разным числом рассматриваемых частиц [1, 3, 5].

2) Шероховатые стенки. В случае диффузного отражения от стенок (с выполнением закона сохранения энергии) скорости частицы, пересекающей на некотором шаге границу куба, придавалось случайное направление внутрь куба.

3) Плазма в термостате. При термостатирующих стенках достигающие стенок частицы возвращались обратно в объем со случайным направлением скорости и кинетической энергией, распределенной по Максвеллу с температурой стенок T_W . Тот факт, что эта процедура не искажала существенно максвелловского распределения, контролировался отдельно.

4) Перестановочная стохастизация. Она состояла в том, что скорости всех электронов перераспределялись через заданные временные интервалы. Скорость одного электрона присваивалась другому, скорость этого другого — третьему и т.д. При этом не изменялись координаты частиц. Такое воздействие, по-видимому, не может моделировать какой-либо конкретный физический процесс. Исследование воздействия перестановочной стохастизации интересно тем, что в этом случае меняется полная энергия отдельных частиц при неизменной полной энергии системы.

5) Стохастизация неупругими столкновениями. Считалось, что пространство заполнено гипотетическим газом двухуровневых атомов. Газ характеризуется плотностью N , заселенностями уровней N_1 и N_2 ($N = N_1 + N_2$) и энергией перехода ε_{12} . Газ двухуровневых атомов рас-

сматривался как термостат с температурой $T_{12} = \varepsilon_{12}/\ln(N_1/N_2)$. Это означает, что величины $N_{1,2}$ и N считались не зависящими от свойств исследуемой плазмы.

Пролетая расстояние l , электрон имеет вероятность $p = 1 - \exp(-l/l_{el})$ испытать упругое столкновение. Здесь $l_{el} = 1/\sigma_{el}N$ — длина свободного пробега, σ_{el} — сечение упругого столкновения.

После того, как определено, что электрон упруго столкнулся с двухуровневым атомом, разыгрывается вероятность реализации одного из атомных состояний $w_1 = N_1/N$, $w_2 = N_2/N$ и вероятность соответствующего неупругого перехода $w_{12} = w_1\sigma_{12}(v)/\sigma_{el}$, $w_{21} = w_2\sigma_{21}(v)/\sigma_{el}$, где v — скорость электрона. При этом для перехода $1 \rightarrow 2$ имеется энергетический порог, равный ε_{12} , а для сечений переходов $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 1$ имеет место соотношение детального баланса

$$\sigma_{12}(v) \frac{m_e v^2}{2} = \sigma_{21} \left(\left(v^2 - \frac{2\varepsilon_{12}}{m_e} \right)^{1/2} \right) \left(\frac{m_e v^2}{2} - \varepsilon_{12} \right).$$

Во всех случаях, испытавший упругое столкновение электрон, хаотически меняет направление скорости. Если имело место и неупругое столкновение, модуль скорости соответственно уменьшается или увеличивается на величину, соответствующую энергии ε_{12} .

4. Некоторые результаты ДМЧ-расчетов

4.1. Квазистационарное состояние

ДМЧ-расчеты эволюции стохастически изолированной плазмы показали, что за время порядка времени пролета электроном среднего межчастичного расстояния τ_{ei} формируется стационарная (или квазистационарная) функция распределения электронов по полной энергии. В области отрицательных энергий распределение, полученное на основе ДМЧ-расчетов, имеет экспоненциальный спад (вместо экспоненциального роста для термодинамического равновесия), при этом отсутствует или близок к нулю рекомбинационный поток. Эти результаты нельзя считать обусловленными недостаточно большим временем наблюдения за эволюцией системы. За рассмотренные времена рекомбинационное распределение должно было успеть сформироваться (рис. 1; см. подробнее в [1, 8]).

При моделировании различных видов воздействия стохастического характера оказалось, что кулоновская система начинает следовать основным законам статистической механики, если оказываемое стохастическое воздействие изменяет энергию отдельных электронов. Одним из примеров такого воздействия является термостатирующее отражение от стенок [1]; вторым — перестановочная стохастизация скоростей [1, 3—5]; третьим — случайные неупругие столкновения с атомами [3—5].

Особый интерес представляют ДМЧ-расчеты с перестановочной стохастизацией [3,5]. В результате ее формируется функция распределения (рис. 2), близкая к диффузионному распределению, полученному с использованием принципа детального равновесия, в то время, как ДМЧ-расчеты без перестановочной стохастизации дают радикально отличающееся распределение.

Исследование свойств использованного при ДМЧ-моделировании алгоритма численного решения уравне-

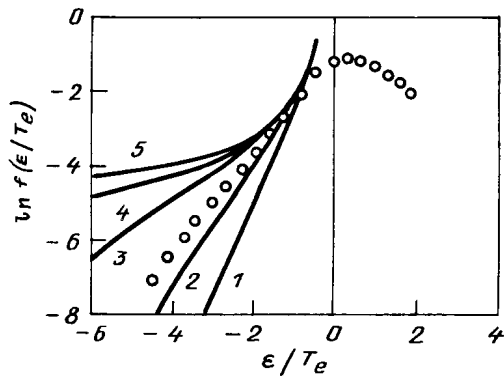


Рис. 1. Сравнение рекомбинационной функции распределения, полученной на основе традиционной теории (сплошные кривые) с результатами ДМЧ-расчетов [1] (точки). Кривые 1—5 соответствуют моментам времени $t/\tau_0 = 1; 2; 5; 10$ и 20 ($\tau_0 = 3m^{1/2}T_e^{3/2}/8\sqrt{2}\pi e^4 AN_e$ — время, характеризующее кулоновские столкновения электронов), в начальный момент времени функции распределения в области отрицательных энергий близка к нулю. Для приведенного результата ДМЧ-расчета $\tau = t/\tau_0 \cong 30$. Согласно данным соответствующего ДМЧ-расчета приведенное здесь распределение устанавливается за время $t \sim \tau_{ei} \cong \tau_0/1,7$ и остается таковым на протяжении всего последующего расчетного времени. (Из [8])

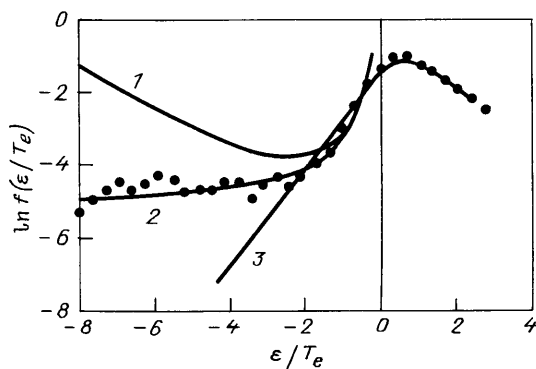


Рис. 2. Функция распределения электронов по полной энергии при наличии перестановочной стохастизации электронов (маркеры). Параметры плазмы и расчетов: $N_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $T_e = 0,35 \text{ эВ}$; $n = 512$; $t = 50\tau_{ei}$. Сплошные кривые: 1 — распределение Больцмана; 2 — фоккер-планковское распределение, полученное с уточненным коэффициентом диффузии [1, 4, 5]; 3 — распределение, полученное на основе ДМЧ-расчета без стохастизации

ний показало, что он позволяет проследить эволюцию до нескольких тысяч кулоновских частиц на временах порядка времени межчастичного пролета с сохранением динамической памяти о начальных координатах и скоростях частиц. На временах, превосходящих время межчастичного пролета, численное решение не является вполне детерминированным — при обращении времени система не возвращается в исходную точку фазового пространства. Погрешности численного счета играют роль внешнего (по отношению к динамическим уравнениям) стохастизатора, который придает динамической системе некоторые статистические свойства. Именно поэтому, на наш взгляд, за времена порядка межчастичного пролета происходит релаксация функции распределения к максвелловскому распределению с новым значением температуры.

Однако численное решение не полностью утрачивает память о динамике системы частиц. Это видно хотя бы из

того, что энергия продолжает сохраняться с высокой точностью ($< 0,1\%$) на временах, много превышающих времена кулоновских столкновений. Мы полагаем, что именно сохранение динамической памяти приводит к заморозке рекомбинации. Эта мысль подтверждалась тем, что когда на систему оказывалось специально запрограммированное внешнее стохастическое воздействие, то рекомбинация имела место. Было показано также [3], что если расчеты проводить с существенно пониженной точностью, то возникает рекомбинационная релаксация.

4.2. Аномальный дрейф в область положительных энергий

Для того чтобы разумно интерпретировать результаты моделирования из первопринципов, пришлось предположить, что имеет место мощный дрейф по энергетической оси из области отрицательных энергий в область положительных энергий электронов. Этот дрейф обусловлен микрополями, создаваемыми всеми кулоновскими частицами. В области отрицательных энергий для характерной величины и характерного времени микроскачка, а также для коэффициента подвижности было положено:

$$\overline{\Delta \varepsilon} \sim (\overline{\Delta \varepsilon^2})^{1/2} \sim e^2 N_i^{1/3}, \quad \tau \sim \tau_{ei}, \quad \tilde{A}_f \sim e^2 N_i^{1/3} \tau_{ei}^{-1}.$$

В соответствии с этими представлениями и учитывая закон сохранения энтропии в гамильтоновых системах, для отношения коэффициентов диффузии и подвижности электрона по энергетической оси без привязки к соотношению детального равновесия в области отрицательных энергий (см. 2.2) было принято выражение [1]:

$$\frac{\tilde{A}_f T_e}{B_f} = \begin{cases} -1 + \frac{T_e}{\varepsilon}, & \varepsilon T_e^{-1} > \alpha \delta^{1/3}, \\ D_1 + D_2 \varepsilon T_e^{-1}, & |\varepsilon T_e^{-1}| \leq \alpha \delta^{1/3}, \\ \beta \delta^{-1/3}, & \varepsilon T_e^{-1} < -\alpha \delta^{1/3}. \end{cases}$$

Здесь индекс f указывает микрополевое происхождение соответствующих величин; D_1, D_2 — величины, зависящие лишь от δ, α, β и обеспечивающие непрерывность отношения $\tilde{A}_f, T_e/B_f$ при переходе из отрицательной в положительную область энергий (см. [1]); α и β — числа, которые можно рассматривать как подгоночные параметры, определяющие соответственно ширину области неидеальности плазмы, где энергия электрона определяется кулоновским взаимодействием с другими частицами, и абсолютную величину коэффициента диффузии в отрицательной области энергий.

Соответственно функция распределения приобретает вид

$$f(y) = \frac{2A}{T_e \sqrt{\pi}} \begin{cases} y^{1/2} \exp(-y), & y > \alpha \delta^{1/3}, \\ D_3 \exp(D_1 y + \frac{D_2 y^2}{2}), & |y| \leq \alpha \delta^{1/3}, \\ D_4 \exp(\beta y \delta^{-1/3}), & y < -\alpha \delta^{1/3}, \end{cases} \quad (2)$$

где $y = \varepsilon/T_e$ — безразмерная энергия, D_3, D_4, A — величины, зависящие лишь от δ, α и β [1].

Путем сопоставления распределения (2) с результатами ДМЧ-расчетов для стохастически изолированной плазмы было выявлено, что хорошее согласие имеет место для $\alpha = 1,5, \beta = 0,4$. При этом один набор из двух констант хорошо описывает результаты ДМЧ-расчетов с сильно отличающимися параметрами плазмы (рис. 3).

4.3. О соотношении с принятой точкой зрения

Из результатов моделирования динамики многих кулоновских частиц и из того, что эти результаты удалось описать ценой отказа от принципа детального равновесия, мы делаем вывод о неэргодичности классической кулоновской плазмы [1]. Обсудим кратко, как этот вывод соотносится с современными представлениями о стохастичности динамических систем (см., например, [21]).

Как известно, в гамильтоновых системах энтропия сохраняется (см., например, [9, 10]) и для того, чтобы согласовать это с экспериментальным фактом возрастания энтропии в реальных физических процессах, проводят различные виды усреднений динамических уравнений. Усреднения приводят к необратимым кинетическим уравнениям. Для оправдания такого усреднения используют введенное еще Гиббсом понятие перемешивания. Речь идет о перемешивании фазового объема, занимаемого ансамблем идентичных систем, с полным объемом так называемой энергетической поверхности, т.е. той части фазового пространства, которая доступна этим системам по закону сохранения энергии. У так называемых перемешивающихся систем фазовый объем, остается согласно теореме Лиувилля постоянным, но в ходе эволюции ансамбля этот объем сильно деформируется, обретая все более развитую поверхность и образуя постепенно всюду плотное множество на энергетической поверхности.

Для того чтобы закон возрастания энтропии в перемешивающихся системах имел место, вводят энтропию Колмогорова, или К-энтропию. При определении К-энтропии разбивают фазовое пространство на ячейки и устремляют их размеры к нулю, следя за тем, чтобы сначала осуществлялся предельный переход к бесконечному времени и в этих ячейках процесс перемешивания успевал совершиться. Определенная таким образом энтропия растет, хотя фазовый объем ансамбля сохраняется.

На наш взгляд, такой подход является просто более изощренным в математическом отношении изложением исходной идеи Гиббса. Более существенным представляется вопрос о физических причинах, по которым принятые усреднения оказываются отражающими действительность.

Мы полагаем, что потеря системой многих частиц динамической памяти действительно имеет место в физических явлениях (т.е. энтропия растет не у гамильтоновых, а у релаксирующих систем) и происходит это за счет внешнего стохастического воздействия, всегда имеющего место в реальных условиях. Разумеется, для систем, перемешивающихся за счет динамического движения, достаточно очень малого (в предельном случае бесконечного времени — бесконечно малого) внешнего стохастического воздействия, чтобы эволюция стала необратимой (перемешивание стало полным).

Однако возможны системы многих частиц, перемешивающиеся за счет эволюции по динамическим законам не со всей энергетической поверхностью, а только с ее частью. Тогда необходимо не исчезающе малое стохастическое воздействие для стимулирования релаксации к термодинамическому равновесию.

Примером такой "кусочно" перемешивающейся системы является, на наш взгляд, классическая кулоновская плазма. Поступательные степени свободы системы многих кулоновских частиц теряют динамическую

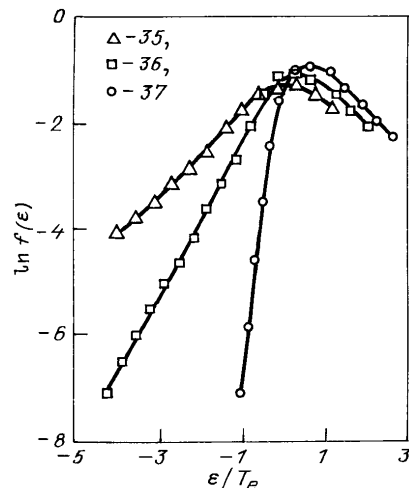


Рис. 3. Распределение электронов по полной энергии. Точки — ДМЧ-расчеты [1]: 35 — $N_e = 10^{20}$ см⁻³, $T_e = 1,7$ эВ (определена как параметр максвелловского распределения по скоростям), $n = 512$; время наблюдения за системой $t = 46\tau_{ei}$, $\delta = 0,12$; 36 — $N_e = 10^{17}$ см⁻³, $T_0 = 0,2$ эВ, $T_e = 0,28$ эВ, $n = 512$; $t = 59\tau_{ei}$, $\delta = 0,027$; 37 — $N_e = 10^{14}$ см⁻³, $T_0 = 0,1$ эВ, $T_e = 0,1$ эВ, $n = 512$, $t = 50\tau_{ei}$, $\delta = 0,0006$. Сплошные кривые — микрополевоe распределение (2) при $\alpha = 1,5$, $\beta = 0,4$

память уже из-за неточностей численного метода решения динамических уравнений. В то же время фазовый переход (рекомбинация) не происходит. По-видимому, поступательные степени свободы перемешиваются уже при эволюции системы по динамическим законам. Однако переход в ту область фазового пространства, которая соответствует появлению достаточно большого числа связанных частиц, не происходит, поскольку с этими частями фазового пространства перемешивания (при движении системы по динамическим законам) нет. Для такого перехода нужно достаточно мощное внешнее стохастическое воздействие.

Свойство "кусочного" перемешивания, на наш взгляд, должно быть характерным не только для систем кулоновских частиц, а вообще для систем, в которых возможен фазовый переход. Более того, разные фазы (разные агрегатные состояния вещества), на наш взгляд, как раз соответствуют тем областям фазового пространства, в которых имеет место динамическое перемешивание для фазового объема ансамбля исследуемых систем. На всей энергетической поверхности перемешиваются, по-видимому, лишь простейшие системы, например, не допускающие связанных состояний (упругие шары).

Возможно, именно с отсутствием динамического перемешивания состояний, находящихся в областях, соответствующих разным фазам, связано наличие метастабильных фазовых состояний (перегретая жидкость, переохлажденный пар). Мы полагаем, что результаты наших исследований указывают на наличие такого метастабильного состояния у переохлажденной плазмы.

4.4. Столкновения с атомами и микрополевоe дрейф

4.4.1. Кинетическая модель. Для выявления стохастизирующей роли случайных столкновений электронов с нейтралами была построена и аналитически исследована кинетическая модель плазмы, смешанной с двухуровневыми атомами. Результаты, полученные на основе рассмотрения кинетической модели, сопоставлялись с

результатами ДМЧ-моделирования из первопринципов [4, 5].

В уравнении диффузии электронов было положено

$$\tilde{A} = \tilde{A}_a + \tilde{A}_f, \quad B = B_a + B_f,$$

где

$$\tilde{A}_a = KT_e \left(\frac{5}{2} x^{1/2} - x^{1/2} \frac{T_e}{T_a} \right), \quad B_a = KT_e^2 x^{1/2},$$

$$\tilde{A}_f = G \left(\frac{\beta}{2^{1/3}} \right) N_e^{2/3} e^2 \left(\frac{2T_e}{m_e} \right)^{1/2}, \quad B_f = GN_e e^4 \left(\frac{2T_e}{m_e} \right)^{1/2}.$$

Здесь величины с индексом "а" определяются столкновениями с двухуровневыми атомами, индекс "f" соответствует величинам, обусловленным взаимодействием с микрополями; $x = -\varepsilon/T_e$,

$$K = \frac{4}{3\pi} \left(\frac{\varepsilon_{12}}{T_e} \right)^2 \sigma_0 \left(\frac{2T_e}{m_e} \right)^{1/2} N_a$$

— эффективная скорость неупругих столкновений, σ_0 — сечение неупругого столкновения электрона с двухуровневым атомом, ε_{12} — энергия перехода в двухуровневом атоме, G — безразмерная константа, которую нельзя определить из расчетов для стохастически изолированной плазмы (там результат определяет отношение \tilde{A}_f/B_f , а не эти величины по отдельности). Как показало сопоставление с результатами ДМЧ-моделирования, $G \cong 0,7 - 0,8$.

Представление коэффициентов диффузии и подвижности в виде суммы столкновительных и микрополевых величин содержит предположение о независимости соответствующих процессов. Как показало сопоставление с результатами ДМЧ-моделирования, это предположение выполняется, во всяком случае, при малых ε_{12} , когда можно использовать диффузионную модель.

4.4.2. Результаты диффузионной модели. Анализ диффузионного уравнения показал, что роль столкновений характеризуется параметром

$$c_1 = \frac{4}{3\pi G} \frac{\sigma_0 N_a}{(e^4/\varepsilon_{12}^2) N_e}.$$

Когда $c_1 \rightarrow 0$, преобладает микрополевой дрейф. При этом для времени рекомбинации в случае идеальной плазмы и не слишком сильно отличающихся температур $T_e/T_a \sim 1$, имеем выражение

$$\tau_{\text{rec}} \propto \frac{T_e^2}{N_e c_1} \exp \frac{\beta}{3c_1 \delta^{1/3}}.$$

Столкновения преобладают при низких степенях ионизации:

$$\alpha = \frac{N_e}{N_a} \ll 2 \cdot 10^{-2} \varepsilon_{12}^2.$$

Здесь положено $\sigma_0 \cong 10^{-15} \text{ см}^2$, $G \cong 1$; ε_{12} измеряется в эВ. Если ориентироваться на характерную энергию $\varepsilon_{12} = 4(m_e T_a / m_a T_e)^{1/2} T_a$, при которой эффективность неупругих столкновений с двухуровневыми атомами соответствует эффективности упругих столкновений, то следует положить $\varepsilon_{12} \sim 10^{-3} \text{ эВ}$ и соответственно,

$\alpha \sim 10^{-6}$. При $\alpha \gg 10^{-6}$ тройная рекомбинация согласно представленной модели должна была бы сильно замедлиться. Это противоречит экспериментальным фактам. Например, плазма инертных газов рекомбинирует и при достаточно высокой степени ионизации, причем экспериментально наблюдаемая скорость рекомбинации согласуется с обычной теорией.

Можно было бы предположить, что имеющееся противоречие связано с необоснованным предположением о независимости столкновительного и микрополевого механизмов релаксации. Для выяснения этого было проведено сравнение с результатами ДМЧ-моделирования.

4.4.3. Сопоставление ДМЧ-расчетов с результатами диффузионной модели. При проведении ДМЧ-расчетов начальные условия, параметры плазмы и характеристики газа двухуровневых атомов задавались так, чтобы для сильно отличающихся значений температуры и плотности плазмы получались серии расчетов с совпадающими безразмерными параметрами δ , c_1 и T_e/T_a . Согласно изложенной выше диффузионной модели характеристики рекомбинации зависят только от этих параметров. Это подтвердилось в результате сопоставления с ДМЧ-расчетами. Таким образом, диффузионная модель и ДМЧ-расчеты, согласуясь друг с другом, противоречат экспериментальным фактам. Имеющееся противоречие нельзя списать на несовершенство диффузионной модели, например, на неоправданность предположения о независимости вклада столкновений и микрополей в релаксацию электронов. Это побудило искать дополнительные механизмы, стимулирующие рекомбинацию в реальных условиях. Выход из противоречия был найден при учете дискретности спектра связанных состояний [4,5].

5. Роль квантовых эффектов

5.1. Кинетический барьер

Как известно, спектр дискретных состояний в кулоновском поле сгущается вблизи границы с континуумом, а энергия связи электрона с ионом определяется выражением $\varepsilon_n = Ry/n^2$, где $Ry = m_e e^4 / 2\hbar^2 \approx 13,6 \text{ эВ}$, n — главное квантовое число. При больших квантовых числах справедливы как квазиклассическое рассмотрение, так и диффузионные модели.

Однако есть основания считать, что для проявления эффектов, связанных с неэргодичностью классической кулоновской плазмы, простого условия $n \gg 1$ недостаточно. Действительно, для проявления микрополевого дрейфа необходимо, чтобы обусловленный им характерный энергетический скачок $\Delta \varepsilon \sim e^2 N_e^{1/3}$ был больше энергии перехода между ближайшими уровнями $\Delta \varepsilon_n \cong 2Ry/n^3$. Следовательно, граница энергетической области определяется выражением

$$-\tilde{\varepsilon} = Ry \left(\frac{e^2 N_e^{1/3}}{2Ry} \right)^{2/3} \cong (2 \cdot 10^{-20} N_e)^{2/9} \text{ эВ} \quad (N_e \text{ в см}^{-3}).$$

Естественно предположить, что для электронов с достаточно большой отрицательной энергией $\varepsilon < \tilde{\varepsilon}$ справедливы обычные представления о парных кулоновских столкновениях и вследствие этого коэффициенты диффузии B и подвижности A в этой области энергий связаны соотношением детального баланса. В то же время

данные ДМЧ-расчетов дают основания предположить, что в области энергий

$$\tilde{\varepsilon} \leq \varepsilon \leq -\varepsilon_0 = \alpha e^2 (2N_e)^{1/3}$$

взаимодействие частиц в плазме носит существенно небинарный характер и имеют место микрополевые соотношения. При этом зависимость величины $\tilde{A}T_e/V$ от энергии имеет форму барьера (рис. 4).

5.2. Тройная рекомбинация в e-i- и в i-i-плазме

Для прямой демонстрации влияния микрополевого дрейфа была проведена табуляция характерных времен рекомбинации плазмы τ_{rec} и $\tau_{\text{rec}}^{(0)}$ соответственно с учетом и без учета кинетического барьера [4, 5]. При $\varepsilon < \tilde{\varepsilon}$ использовалось одноквантовое приближение [13—16], $\tilde{\varepsilon}$ определялось приведенным выше выражением.

Результаты расчетов $\tau_{\text{rec}}^{(0)}$, проведенных без учета многочастичных эффектов, для проверки сопоставлялись с известными табуляциями (см., например, [15]), проведенными на основе ударно-излучательной модели. В области параметров плазмы, для которых можно пренебречь радиационными переходами, имело место хорошее согласие. Отметим, что при вычислении $\tau_{\text{rec}}^{(0)}$ рекомбинационное распределение сшивалось с больцмановским при $|\varepsilon| \rightarrow -0$.

Результаты расчетов для электрон-ионной (e-i) плазмы показывают, что величины τ_{rec} и $\tau_{\text{rec}}^{(0)}$ отличаются в 2—3 раза. Это связано с использованием более точного по сравнению с обычно принятым граничного условия при вычислении τ_{rec} . Это различие не очень велико, но оно могло бы объяснить имеющийся разницей экспериментальных данных для численного коэффициента в законе "девять вторых" (см. п. 2.1).

Более существенные отличия имеют место при малых и больших плотностях электронов. Однако при малых плотностях e-e-i-рекомбинация слаба по сравнению с радиационной рекомбинацией, которая должна маскировать обсуждаемый эффект задержки тройной рекомбинации. Высоким же плотностям соответствуют очень малые времена рекомбинации ($< 10^{-10}$ с). Получение и диагностика такой плазмы весьма затруднительны.

Из всего этого следует, что наблюдение эффектов, связанных с наличием диффузионного барьера, для e-i-плазмы проблематично. Изложенное выше объясняет, почему замедление рекомбинации, связанное с проявлением неэргодичности кулоновской системы, не проявляется достаточно существенным образом в обычных условиях, например, в послесвечении газового разряда.

Для наблюдения задержки рекомбинации естественно обратиться к рассмотрению системы зарядов из тяжелых частиц. Заранее ясно, что для тяжелых частиц более справедливы классические представления, в частности, дискретный характер спектра проявляется несравненно слабее.

Это подтверждают и численные расчеты — i-i-рекомбинация согласно результатам [4, 5] на много (10—15) порядков меньше, чем это следует из обычной диффузионной теории или теории Томсона (см. п. 2.1). Например, при $N_i \sim 10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ время i-i-рекомбинации составляет $\tau_{\text{rec}} \sim 10^5 \div 10$ с в то время, когда согласно обычной теории $\tau_{\text{rec}}^{(0)} < 10^{-12}$ с (при $T \approx 0, 2$ эВ).

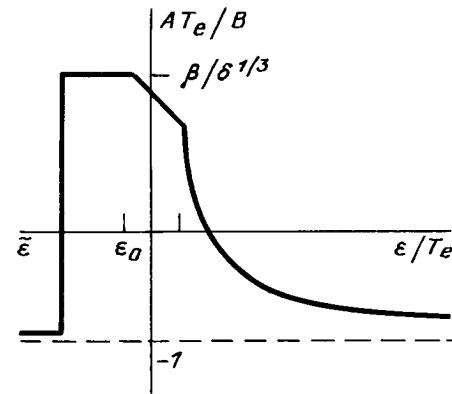


Рис. 4. Качественный вид зависимости от энергии отношения коэффициентов подвижности и диффузии по энергетической оси (кинетический барьер)

6. Термодинамика метастабильной плазмы в смеси с идеальным газом

6.1. Термодинамические параметры

Исходя из функции распределения (2) и используя известные термодинамические соотношения, можно найти термодинамические характеристики стохастически изолированной плазмы в смеси с идеальным газом [6, 7]: полную энергию; свободную энергию; энтропию и другие, следующие из этих выражений термодинамические характеристики. Приведем выражение только для полной энергии

$$E = 2n_i T \left(\frac{3}{2\alpha} + u(\delta) \right).$$

Здесь полагается, что плазма представляет собой однородную смесь $2n_i$ ионов и n_n нейтральных частиц; $n_i = N_i V$ — полное число ионов одного знака в рассматриваемом объеме V , $\alpha = 2n_i / (n_n + 2n_i)$ — степень ионизации плазмы (не смешивать с параметром α функции распределения); u — нормированная на температуру средняя потенциальная энергия ($u < 0$), приходящаяся на частицу. Величина

$$u(\delta) = \frac{1}{2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} y f(y) dy - \frac{3}{2} \right)$$

протабулирована в [6], предельные выражения имеют вид

$$u \cong 1, 8\delta^{1/2} \text{ при } \delta \rightarrow 0, \\ u \cong -\delta^{1/3} \frac{\alpha\beta + 1}{2\beta} \cong -2\delta^{1/3} \text{ при } \delta \rightarrow \infty.$$

Отметим, что в пределе идеальной плазмы $\delta \rightarrow 0$ имеет место численное совпадение значения константы, определяемой теорией [6], основанной на выражении (2) для функции распределения электронов, и константы ($u = -\sqrt{\pi}\delta \cong -1, 77\sqrt{\pi}$), которую дает дебаевская теория (в ней, как известно, энергия взаимодействия экранированных зарядов получена из уравнения Пуассона при его разложении по малому отношению потенциальной энергии к кинетической). Это говорит о том, что не

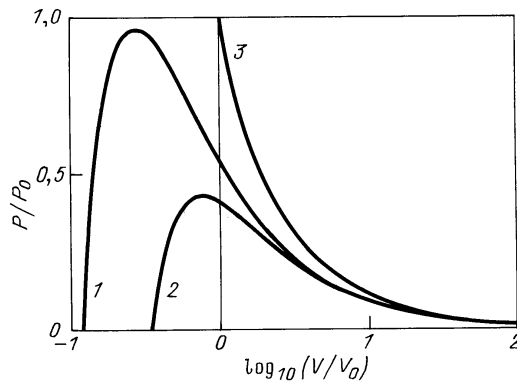


Рис. 5. Универсальная изотерма полностью ионизированной метастабильной плазмы (зависимость приведенного давления от приведенного объема). 1 — наша теория; 2 — дебаевская теория; 3 — изотерма идеальной плазмы

только вид функции распределения, но и значения констант α , β выбраны удачно. Трудно предположить, что совпадение этих численных значений носит случайный характер.

6.2. Уравнение состояния и изотермы

Из выражения для свободной энергии (или из теоремы Клаузиуса о вириале) следует уравнение состояния смеси идеального газа с метастабильной плазмой:

$$P = 2N_i T \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{u(\delta)}{3} \right), \quad p = \delta \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{u(\delta)}{3} \right).$$

Здесь $p = P/P_0$ — приведенное давление, $P_0 = T^4/e^6$; параметр идеальности δ можно рассматривать как обратную величину соответствующим образом нормированного объема V , занимаемого системой частиц:

$$\delta = V_0 V^{-1}, \quad V_0 = 2ne^6 T^{-3}.$$

Качественный вид изотермы, следующей из теории [6, 7], не очень сильно отличается от дебаевской (рис. 5). Это удивительно, поскольку дебаевская теория применима лишь при $1/\delta \rightarrow \infty$. С уменьшением объема давление достигает максимума, а затем падает, переходя в отрицательную область и устремляясь к $-\infty$.

Область параметров, где с уменьшением объема падает давление, является неустойчивой. Сила, действующая на элемент плазменной жидкости, равна градиенту давления с отрицательным знаком. Соответственно, плазменный сгусток при положительной производной от давления по объему должен не расширяться в сторону уменьшающегося давления, а сжиматься. Область отрицательных давлений ($\delta > 8,34$) соответствует возникновению сжимающих упругих сил. Кулоновские силы сжимают такую плазму даже в отсутствие градиентов давления.

Предельное значение параметра неидеальности, когда полностью ионизированная неидеальная плазма еще может быть термодинамически устойчивой, составляет $\delta_{cr} = 3,5$ (этому значению соответствует давление $p_{cr} = 0,96p_0$). При $\delta > \delta_{cr}$ имеет место схлопывание плазмы.

У изотерм плазменно-газовой смеси максимум смещается в область малых значений $1/\delta$ с уменьшением степени ионизации. При этом расширяется область

термодинамической устойчивости смеси. Например, при $\alpha = 0,1$ имеем $\delta_{cr} \cong 2000$, $p_{cr} \cong 5400p_0$. Для комнатной температуры $T \cong 0,03$ эВ критические давления и плотности составляют $N_{i,cr} \cong 10^{19}$ см $^{-3}$, $P_{cr} = 2,3$ атм. Степень ионизации должна быть достаточно высокой ($\alpha > 10^{-3}$), иначе плазма не будет метастабильной (подробнее см. [4, 5] и выше, п. 3).

В диапазоне параметров $\delta_{cr} > \delta > 3,5$ плазменная компонента уже обладает аномальными свойствами, но ее смесь с идеальным газом устойчива. В этих условиях плазменный сгусток, являющийся компонентом идеального газа, стремится принять шарообразную форму. При $\delta_{cr} > \delta > 8,35$ становятся существенными упругие свойства плазменно-газовой смеси — кулоновское сжатие преобладает над плазменным давлением, но недостаточно сильно, чтобы вызвать схлопывание газа. Такой плазменный сгусток, находящийся по давлению в равновесии с окружающим неионизованным газом, должен вести себя подобно легкому упругому мячику.

Следует, конечно, помнить, что расширение области термодинамической устойчивости смеси по сравнению с областью устойчивости метастабильной плазмы основано на предположении о равномерном перемешивании газа и плазмы. На самом деле плазменный сгусток внутри газового облака благодаря аномальным свойствам стремится сжаться, чему препятствует давление нейтрального газа. На временах порядка диффузионных плазменная и газовая компоненты должны разделиться, что приведет к схлопыванию метастабильной плазмы.

6.3. Характеристики адиабатических процессов

При рассмотрении адиабатических (изэнтропических) процессов в смеси метастабильной плазмы с идеальным газом можно выразить в параметрическом виде через величину δ зависимость друг от друга термодинамических параметров N_i , T , P , если заданы начальные значения N_{i0} , T_0 , P_0 , хотя бы двух из этих трех величин.

Соответствующие функции протабулированы в [7]. Интересен тот факт, что при $\delta > \delta_{cr} = 8,35$ давление становится отрицательным, как это имеет место и при движении по изотерме. Однако при адиабатических процессах переход к отрицательным давлениям осуществляется до изменения знака производной.

Как и в случае изотермических процессов, с уменьшением степени ионизации расширяется область термодинамической устойчивости плазменно-газовой смеси. В частности, критическое для этих процессов значение δ_{cr} , соответствующее нулевому давлению, резко ($\propto \alpha^{-3}$) растет с уменьшением степени ионизации. Например, при $\alpha \approx 0,1$ имеем $\delta_{cr} \sim 10^4$. В диапазоне параметров $\delta_{cr} > \delta > 8,5$ плазменная компонента уже обладает аномальными свойствами, но ее смесь с идеальным газом устойчива.

Самостоятельный интерес представляет зависимость от параметров плазмы производной от давления по плотности, поскольку она связана со скоростью звука. Отношение скорости звука в полностью ионизированной метастабильной плазме к скорости звука в одноатомном идеальном газе при той же температуре можно представить как функцию одного только параметра идеальности δ . Эта величина протабулирована в [7]. Скорость звука в слабо неидеальной плазме несколько меньше скорости звука в полностью идеальном газе. По мере

возрастания параметра идеальности δ она падает и даже оказывается мнимой при $\delta > 14,5$. Однако, как уже отмечалось выше, давление становится отрицательным при меньших значениях δ .

При малых степенях ионизации становится слабым и влияние плазменной компоненты на скорость звука в плазменно-газовой смеси. Тем не менее при $\delta > 14,5$ в такой смеси может иметь место мнимая скорость звука. В этом случае связь звуковых и ионно-звуковых колебаний может быть сильной.

7. Заключение

Обнаруженный в работах [1—5] эффект аномальной задержки тройной рекомбинации в классической кулоновской плазме представляет, на наш взгляд, интерес в двух аспектах: во-первых, как фундаментальный результат, который приводит к необходимости отказаться от давно сложившихся представлений в статистике изолированных (микрочанонических) систем; во-вторых, как прикладной результат, который, в принципе, дает возможность формировать долгоживущие плазменные образования.

Отметим, однако, что изложенная в п. 6 теория термодинамических свойств метастабильной плазмы базируется на выражении (2) для функции распределения заряженных частиц по полной энергии. Это выражение проверено непосредственными численными расчетами лишь для $e - i$ -плазмы в случае не очень больших параметров идеальности до $\delta \sim 1$. Для проверки надежности полученных результатов при $\delta \gg 1$ нужны дополнительные экспериментальные и компьютерные исследования. Необходимы также исследования механизмов возникновения микрополевого дрейфа по энергетической оси, обнаруженного при ДМЧ-моделировании.

Как ясно из проведенного обзора работ [1—8], метастабильная плазма имеет свойства, близкие к тем, которые в литературе принято связывать с шаровой молнией (см., например, [22] и цитируемую там литературу). Однако уверенный вывод о том, что шаровая молния — сгусток смеси метастабильной плазмы с воздухом, можно будет сделать только после воспроизводимого получения этого объекта в лаборатории. Основные трудности получения метастабильной плазмы обусловлены требованием высокой степени ионизации ($\alpha > 10^{-3}$ согласно теории [4, 5]), при практи-

чески полностью отсутствующих электронах. Поиск условий, при которых все электроны находятся в связанном состоянии с электроотрицательным газом, представляет собой отдельную непростую задачу [17].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-02-16872).

Список литературы

1. Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Изв. вузов. Сер. Физика* (11), 5 (1991).
2. Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Изв. вузов. Сер. Физика* (2), 10 (1992); в кн. *Неравновесная плазма многозарядных ионов* (Под ред. Яковленко С.И.) (М.: Наука, 1992) (Тр. ИОФРАН; т. 40).
3. Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Изв. вузов. Сер. Физика* (11), 76 (1992).
4. Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Изв. вузов. Сер. Физика* (1), 68 (1993); *Препринт ИОФРАН № 21* (М., 1992).
5. Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Мат. моделирование* 4 (7), 3 (1992).
6. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Препринт ИОФРАН № 10* (М., 1993); *Изв. вузов. Сер. Физика* (1), 8 (1994).
7. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Препринт ИОФРАН № 18* (М., 1993); *Изв. вузов. Сер. Физика* (1), 15 (1994).
8. Ткачев А.Н., Яковленко С.И. *Препринт ИОФРАН № 20* (М., 1993); *Изв. вузов. Сер. Физика* (в печати).
9. Майер Д., Гешперт-Майер М. *Статистическая физика* (М.: Наука, 1980).
10. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл). *Введение в квантовую статистическую механику* (М.: Наука, 1984).
11. Яковленко С.И. *Вопросы философии* (2), 141 (1992).
12. Яковленко С.И. *Вопросы философии* (11), 152 (1993).
13. Гудзенко Л.И., Шелепин Л.А., Яковленко С.И. *УФН* 114, 457 (1974).
14. Гудзенко Л.И., Яковленко С.И. *Плазменные лазеры* (М.: Атомиздат, 1978).
15. Держиев В.И., Жидков А.Г., Яковленко С.И. *Излучение ионов в неравновесной плотной плазме* (М.: Энергоатомиздат, 1986).
16. *Плазменные лазеры видимого и ближнего УФ диапазонов* (Под ред. Яковленко С.И.) (М.: Наука, 1989) (Тр. ИОФРАН; т. 21).
17. Бойченко А.М., Яковленко С.И. *КЭ* 21 (1) (1993).
18. Гуревич А.В. *Геоман. и астрономия* 4, 3 (1964).
19. Гуревич А.В., Питаевский Л.П. *ЖЭТФ* 46, 1281 (1964).
20. Хокни Р., Иствуд Д. *Численное моделирование методом частиц* (М.: Мир, 1987).
21. Заславский Г.М. *Стохастичность динамических систем* (М.: Наука, 1984).
22. Стаханов И.П. *О физической природе шаровой молнии* (М.: Энергоатомиздат, 1985).

METASTABLE SUPERCOOLED PLASMA

S.A. Maiorov, A.N. Tkachëv, S.I. Yakovlenko

*Institute of General Physics, Russian Academy of Sciences
38, Ulitsa Vavilova, 117942, Moscow, Russian Federation
Tel. (095) 132-8280*

A review of Coulomb plasma ab initio simulations and analytical research performed by the authors since 1987 presented. It is shown that classical Coulomb plasma has metastable supercooled state similar to state of supercooled vapor. The triple recombination at this state is suppressed. Supercooled state results from entropy conservation law for Hamilton system. Ion-ion plasma with heavy both positive and negative particles at high ionization degree ($> 10^{-3}$) is needed to have a metastable supercooled plasma. Supercooled state thermodynamic law is given. It is shown that mixture of a supercooled plasma with a gas may form a plasmod like ball lightning.

Bibliography — 22 references

Received 11 November 1993, revised 30 November 1993