ЖЭТФ, 2005, том 127, вып. 2, стр. 412–430

СТОЛКНОВЕНИЯ И ПЛАЗМЕННЫЕ ВОЛНЫ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

И. В. Морозов[*], *Г. Э. Норман*[**]

Институт теплофизики экстремальных состояний
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 апреля 2004 г.

Плазменные волны и характер столкновений частиц в равновесной двухкомпонентной неидеальной плазме, состоящей из невырожденных электронов и однократно заряженных ионов, рассмотрены на основе моделирования методом молекулярной динамики. Определены дисперсия частоты и декремента затухания ленгмюровских волн. Указан метод обобщения теории плазменных волн в идеальной плазме для расширения области применимости теории в сторону неидеальной плазмы. Определены проводимость и динамическая частота столкновений, зависящая от частоты возмущения. Рассмотрена релаксация энергии электронов и ионов в неравновесной плазме.

PACS: 52.25.Fi, 52.25.Os, 52.27.Gr, 52.35.Tc

1. ВВЕДЕНИЕ

Неидеальная плазма изучается экспериментально в ударных волнах в газах [1–3] и твердых телах [4–6], при электровзрыве проводников [7, 8] и др. Вместе с тем построение теории неидеальной плазмы наталкивается на значительные трудности, что связано, в частности, с изменением характера экранирования при переходе от идеальной к неидеальной плазме. Результаты теории идеальной плазмы получены в предположении о том, что сфера дебаевского экранирования содержит большое число частиц, а столкновения частиц являются слабыми с рассеянием на малые углы. В неидеальной плазме, напротив, экранирование происходит уже на расстояниях, сравнимых со средним межчастичным расстоянием, а дебаевская сфера формально содержит меньше одной частицы (десятые и даже сотые доли частицы). Поэтому простая экстраполяция результатов теории идеальной плазмы в область неидеальности для большинства задач приводит к неправильным результатам и существенным расхождениям с экспериментальными данными. Без построения адекватной модели столкновений в неидеальной плазме невозможно рассмотрение следующих вопросов:

— статическая и динамическая проводимость;

— область существования и декремент затухания плазменных волн;

— характер релаксационных процессов и время установления равновесия в неравновесной неидеальной плазме;

— поглощение энергии электромагнитного поля в плазме.

Особое место в этом списке занимают плазменные волны. Экстраполяция результатов теории Ландау [9] приводит к выводу о том, что ленгмюровские волны не могут распространяться в неидеальной плазме [10]. В то же время ленгмюровские и ионно-звуковые плазменные волны были обнаружены в теоретических работах [11–14] и работах по компьютерному моделированию неидеальной плазмы [15–19]; эти результаты были согласованы в [20, 21] с экспериментальными данными. Тем не менее эта точка зрения так и не стала общепризнанной. Поэтому свойства ленгмюровских волн в неидеальной плазме, в частности, их дисперсия и декремент затухания, остаются сравнительно мало исследованными.

[*]E-mail: bogous@orc.ru
[**]E-mail: henry_n@orc.ru

В связи с тем, что теория идеальной плазмы [9, 10, 22–25] развита достаточно хорошо и описывает немало эффектов, связанных с плазменными волнами, весьма желательным представляется поиск таких параметров, модификация которых позволила бы распространить эту теорию и для решения некоторого круга задач неидеальной плазмы. В настоящей работе в качестве свободного параметра рассматривается комплексная эффективная частота столкновений, значения которой определяются из моделирования методом молекулярной динамики (МД). Наличие плазменных волн в неидеальной плазме, подтвержденное результатами МД, открывает путь к применению богатого теоретического арсенала, разработанного для идеальной плазмы.

Несмотря на то что формула Ландау для релаксации энергии в двухтемпературной системе [9] выводилась в приближении слабого столкновительного затухания, она широко используется и для оценки скорости релаксации в неидеальной плазме. При этом в работах [4, 6] были выявлены существенные (на несколько порядков величины) расхождения экспериментальных данных с теорией. Кроме того, анализ экспериментов по проводимости неидеальной плазмы [20, 21] указывает на наличие неравновесности на временах, существенно больших, чем время релаксации, определенное по формулам идеальной плазмы. Поэтому в настоящей работе предпринята также попытка исследовать характер и длительность релаксационных процессов в полностью ионизованной сильно неравновесной неидеальной плазме с помощью МД.

В разд. 2 указана исследуемая область параметров, кратко описаны модель плазмы и метод моделирования. Раздел 3 посвящен определению дисперсии и декремента затухания ленгмюровских волн в неидеальной плазме. Вначале кратко рассмотрена теория идеальной плазмы, а затем показано, каким образом результаты этой теории могут быть расширены в область неидеальности. Обсуждаются границы применимости такого расширения. В разд. 4 приведен расчет проводимости и связанной с ней величины — эффективной частоты столкновений. Рассмотрен как статический случай, так и зависимость от частоты возмущающего воздействия. В разд. 5 изучается релаксация энергии в плазме из различного типа неравновесных состояний. Зависимость частот соударений от отношения масс электронов и ионов m/M при различных степенях неидеальности обсуждается в пп. 2.1, 4.3 и 5.3. Основные результаты работы суммированы в разд. 6.

2. МОДЕЛЬ ПЛАЗМЫ

2.1. Физическая модель

Выбор физической модели (modelling) неидеальной плазмы включает такие вопросы как определение области исследования, в том числе по степени ионизации, учет квантовых эффектов, выбор числа частиц в расчетной ячейке, оценка возможной зависимости результатов от M/m.

В работе исследуется двухкомпонентная невырожденная система однократно заряженных частиц — электронов и ионов с массами, соответственно m и M. Основными параметрами плазмы являются параметр неидеальности Γ, число частиц в сфере Дебая N_D, частота ω_p и период τ_e электронных плазменных колебаний, дебаевская длина r_D:

$$\Gamma = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{1/3} \frac{e^2}{k_B T}, \quad N_D = \frac{4\pi r_D^3 n_e}{3},$$

$$\omega_p = \frac{2\pi}{\tau_e} = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m}}, \quad r_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n_e e^2}},$$

где n_e — концентрация электронов, e — заряд электрона, T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Значения параметра неидеальности варьируются в пределах $0.1 < \Gamma < 4$ ($4 > N_D > 0.03$). Плазма предполагается полностью ионизованной. Это соответствует электронным концентрациям $n_e \sim (10^{17}–10^{24})\,\text{см}^{-3}$ и температурам $T \sim (10^4–10^6)$ К (рис. 1) для равновесной плазмы. Эта область на рис. 1 заштрихована; ее вертикальная граница слева указана условно, так как она смещается влево и вправо в зависимости от химического элемента. Под полностью ионизованной плазмой подразумевается плазма со степенью ионизации 10^{-1} и выше, когда столкновениями с нейтралами можно пренебречь.

Неравновесная неидеальная плазма может существовать при температурах, меньших 10^4 К, включая комнатную и ниже. Переохлажденная метастабильная неидеальная плазма рассматривалась теоретически [26, 27]; результаты, представленные в работах [28, 29], истолкованы в [27] как экспериментальное свидетельство существования такой плазмы. Ультрахолодная неидеальная плазма при температурах около 1 К стала объектом экспериментальных исследований в последние годы [30]. Результаты, полученные в настоящей работе, можно применять и к неравновесной неидеальной плазме при низких температурах.

В работе исследуется невырожденная плазма, однако учет квантовых эффектов в парном взаимодействии зарядов необходим, поскольку только

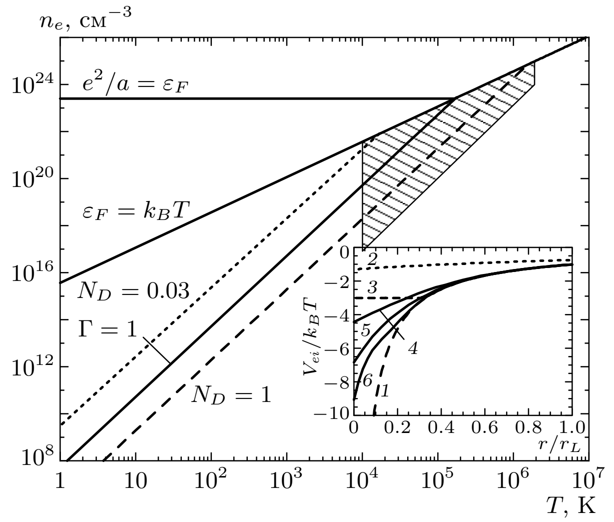

Рис. 1. Диаграмма температура–концентрация для электронов. Область между кривыми $N_D = 1$ и $\varepsilon_F = k_BT$ соответствует невырожденной неидеальной плазме, между $\varepsilon_F = k_BT$ и $e^2/a = \varepsilon_F$ — вырожденной неидеальной плазме (ε_F — энергия Ферми, $a = (4\pi n_e/3)^{1/3}$ — среднее межчастичное расстояние). Область, исследуемая в настоящей работе, заштрихована. На вставке показаны потенциалы электрон-ионного взаимодействия: *1* — кулоновский, *2* — Дойча [35, 36], *3* — модель [33], *4, 5, 6* — Кельбга [34]: $T = 10^5$ К (*4*), $3\cdot10^4$ К (*5*), $T = 10^4$ (*6*); длина Ландау $r_L = e^2/k_BT$

они обеспечивают устойчивость неидеальной плазмы. Принципиальная роль ферми-статистики для предотвращения коллапса кулоновской системы показана в работе [31], однако для термодинамической устойчивости неидеальной невырожденной плазмы достаточно и парных квантовых эффектов [32]. Для их учета используется псевдопотенциальный подход [33]. Квантовые эффекты в рассеянии приводят к эффективному ослаблению отталкивания электронов друг от друга и ослаблению притяжения электронов к ионам.

Мы исследуем подсистему свободных зарядов, поэтому в модели плазмы необходимо исключить возможность образования связанных состояний. Для этого применяется дополнительное уменьшение глубины электрон-ионного псевдопотенциала на малых расстояниях [33]. В работе используется квазиклассический псевдопотенциал Кельбга [34]. На вставке рис. 1 показаны различные типы потенциалов электрон-ионного взаимодействия $V_{ei}(r)$, используемые для моделирования неидеальной плазмы. Электрон-электронное взаимодействие $V_{ee}(r)$, соответствующее кривой *3*, совпадает с кулоновским, а остальные потенциалы имеют более мягкий отталкивающий потенциал $V_{ee}(r)$.

Преимущество потенциала Кельбга по сравнению с усеченным потенциалом [33] и высокотемпературным потенциалом Дойча [35, 36] состоит в том, что его значение и первая производная в нуле совпадают с аналитическим решением двухчастичной квантовомеханической задачи рассеяния. В то же время, в рассматриваемой области параметров удельный объем связанных состояний остается относительно малым [33], поэтому вид потенциала на малых расстояниях не играет существенной роли. В приведенных ниже расчетах использовался потенциал Кельбга (кривая *5*, рис. 1) ($T = 30000$ К). Чем ниже T, тем хуже работает данное приближение. Для ультрахолодной плазмы требуются дополнительные расчеты с другими псевдопотенциалами.

С физической точки зрения число частиц N в расчетной ячейке должно быть таким, чтобы размер этой ячейки был много больше r_D в идеальной плазме или много больше радиуса дальнего порядка (экранирования) в сильнонеидеальной плазме. Число частиц $N \approx 100$ оказывается достаточным при $\Gamma \gtrsim 1$ для расчета как термодинамики равновесной плазмы, так и электрон-ионной релаксации в неравновесной плазме (см. [37]). Для исследования дисперсии плазменных волн минимальное значение N определяется волновым вектором k. Поэтому для проверки целесообразно проведение расчетов с различными N при одном и том же k.

Переходя к выбору массы ионов, отметим, что чем больше масса ионов, тем длиннее расчет, поскольку шаг численного интегрирования определяется движением электронов, а длительность МД-траектории — временем перемешивания ионных траекторий. Поэтому выбор максимального M определяется компьютерным быстродействием (см. п. 2.2). Чтобы не проводить расчет для каждого M, имеет смысл найти интерполяционные и экстраполяционные формулы.

Исходя из элементарных формул механики для соударений частиц с разными массами, можно ожидать, что характеристики столкновений распадаются на две группы. В одной группе, где определяющим являются электрон-электронные соударения на фоне соударений с массивными ионами, зависимость от M должна исчезать, начиная с некоторого значения M/m. Задача МД состоит в том, чтобы определить это значение. Как будет показано в п. 4.3, характеристики таких соударений выходят на константу, начиная с $M/m = 10^2$. Другая группа соударений характеризует обмен энергией между электронами и ионами и должна зависеть от M/m. В идеальной плазме эта зависимость хорошо известна, задача МД — определить эту зависимость для неидеальной плазмы (разд. 5).

2.2. Численная модель

Характеристики численного моделирования (simulation) методом МД включают выбор схемы численного интегрирования, способ расчета сил, метод усреднения для получения нужной статистической погрешности и разнообразные способы диагностики, т. е. способы вычисления наблюдаемых величин по известным траекториям электронов и ионов.

Для решения уравнений движения применяется схема с перешагиванием (Leap-frog) второго порядка точности. Шаг интегрирования по времени выбирается таким образом, чтобы полная энергия системы сохранялась с точностью не хуже 0.1 % (более подробно о сохранении энергии см. [38]). При расчете сил, действующих на частицы, находящиеся в МД-ячейке, применяются периодические граничные условия и метод ближайшего образа.

Полное число частиц в МД-ячейке составляет $N = 128$–5000. При малых N результаты МД-моделирования для термодинамических величин и корреляционных функций имеют заметную статистическую погрешность. Увеличение N сверх физически обоснованного значения с целью повышения точности результатов приводит к росту времени расчета пропорционально N^2, поэтому более предпочтительным представляется усреднение по ансамблю из I независимых начальных состояний. В этом случае время расчета растет пропорционально I, а точность статистического усреднения определяется величиной $(NI)^{-1/2}$.

Согласно [38] наличие небольших ошибок численного интегрирования и ляпуновского разбегания траекторий приводит к тому, что МД-траектория отклоняется от точной ньютоновской за время, называемое временем динамической памяти t_m, и, таким образом, «забывает» свое предыдущее состояние. При этом макроскопические параметры плазмы остаются постоянными. Эта естественная стохастизация МД-систем очень удобна для получения статистического ансамбля, поскольку конфигурации частиц, выбранные на одной траектории в моменты времени, отстоящие на время динамической памяти, оказываются статистически независимыми. Таким образом, одна МД-траектория длительностью $(10^3$–$10^5)t_m$ может использоваться для генерации ансамбля независимых состояний.

При расчете динамики электронов на временах порядка нескольких периодов электронной плазменной частоты τ_e движением ионов можно пренебречь. Однако использование траектории с неподвижными ионами не обеспечивает усреднения по ионным конфигурациям. Поэтому в разд. 3 и 4 используется соотношение масс ионов и электронов $M/m = 100$. В этом случае движение ионов, хотя и не соответствует реальной плазме, но, как показано в п. 4.3, слабо влияет на динамику электронов на коротких временах и вместе с тем позволяет провести усреднение по ионным конфигурациям на больших временах.

В разд. 5 изучается релаксация энергии, для которой масса ионов имеет принципиальное значение. Здесь для получения ансамбля начальных состояний рассчитывается вспомогательная равновесная траектория с $M/m = 1$, из которой выбираются точки, отстоящие на время t_m. Полученные конфигурации используются для расчета релаксации с последующим усреднением, как описано в п. 5.1. Величина M/m не влияет на ансамбль равновесных конфигураций, а время расчета равновесных траекторий существенно сокращается при $M/m = 1$. При расчете же релаксации устанавливается требуемое соотношение масс с соответствующей перенормировкой скоростей ионов.

Методы диагностики приводятся ниже при изложении каждой конкретной задачи.

3. ПЛАЗМЕННЫЕ ВОЛНЫ В РАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

3.1. Ленгмюровские волны в идеальной плазме

Напомним основные выражения для диэлектрической проницаемости идеальной плазмы [9, 22], записав их в безразмерном виде. Все временны́е величины мы будем нормировать на плазменную частоту ω_p: $\omega/\omega_p \to \omega$, $\nu/\omega_p \to \nu$, $\sigma/\omega_p \to \sigma$, $\delta/\omega_p \to \delta$, а пространственные — на дебаевскую длину r_D: $kr_D \to k$. Решение дисперсионного уравнения

$$\varepsilon(\omega - i\delta, k) = 0 \tag{1}$$

для диэлектрической проницаемости в форме Ландау [9] дает дисперсию и декремент ленгмюровских волн в виде

$$\omega^2 = 1 + 3k^2, \tag{2}$$

$$\delta = \delta_c + \delta_L = \frac{\nu}{2} + \sqrt{\frac{\pi}{8}}\,\frac{1}{k^3}\exp\left(-\frac{1}{2k^2} - \frac{3}{2}\right), \quad (3)$$

где $\delta_c = \nu/2$ — декремент, обусловленный столкновительным затуханием, δ_L — затуханием Ландау.

Эффективная частота электрон-ионных столкновений ν имеет вид [9]

$$\nu_{ei} = \sqrt{3} Z \Gamma^{3/2} L_e. \quad (4)$$

Эта формула несправедлива при $\Gamma > 0.1$ из-за расходимости выражения для L_e. При экстраполяции этой формулы в область неидеальности с фиксированным кулоновским логарифмом $L_e = 3.2$ [39] величина δ_c становится больше единицы при $\Gamma > 1.2$, что ограничивает область существования ленгмюровских волн. Однако такая экстраполяция выходит далеко за область применимости теории Ландау. Более точные оценки [14] указывают на то, что величина ν при увеличении Γ проходит через максимум, оставаясь при этом меньше единицы. Таким образом, можно предположить, что в неидеальной плазме ленгмюровские волны существуют, а затухание Ландау и дисперсия существенно не изменятся [14].

Выражения (2), (3) получены в длинноволновом приближении, поэтому при больших k необходимо использовать модель [22], в которой

$$\varepsilon(\omega, k) = 1 + \frac{1}{k^2}\,\frac{1 - J_+\left(\dfrac{\omega + i\nu}{k}\right)}{1 - \dfrac{i\nu}{\omega + i\nu}\,J_+\left(\dfrac{\omega + i\nu}{k}\right)}, \quad (5)$$

где

$$J_+(x) = x\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\int\limits_{i\infty}^{x}\exp\left(\frac{\tau^2}{2}\right)d\tau\,. \quad (6)$$

Решение дисперсионного уравнения (1) в этом случае определяется численно.

3.2. Динамический структурный фактор

Анализ плазменных волн в неидеальной плазме можно провести на основе расчета динамического структурного фактора (ДСФ) «заряд–заряд». Его действительная часть связана с мнимой частью диэлектрической проницаемости [23, 40]:

$$S(\omega, k) = -\frac{k_B T}{4\pi^2 e^2}\,\frac{k^2}{\omega}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\varepsilon(\omega, k)}. \quad (7)$$

В настоящей работе ДСФ определялся из МД-моделирования. Вначале с использованием равновесной МД-траектории рассчитываются автокорреляционные функции плотности для электронов и ионов,

$$F_{cd}(k, t) = \frac{1}{N_c N_d}\times \\ \times\left\langle\sum_{j=1}^{N_c}\sum_{k=1}^{N_d}\exp\{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_k(0))\}\right\rangle, \quad (8)$$

где $\mathbf{r}_j(t)$ — координата частицы j в различные моменты времени, $c, d = e, i$ — сорт частиц. Усреднение проводится по начальным конфигурациям $\mathbf{r}(0)$ и по направлениям волнового вектора $\mathbf{k}$ в силу изотропии плазмы. Поскольку МД-ячейка является ограниченной, спектр возможных значений $k = 2\pi l/L$ дискретен, а минимальное значение $k = 2\pi/L$, где L — ребро ячейки, l — целое число. Для предельного перехода $k \to 0$ необходимо увеличивать МД-ячейку, что приводит к росту числа частиц N и увеличению времени расчета.

Искомый ДСФ находится из преобразования Фурье:

$$S(\omega, k) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{\infty} F_{zz}(k, t)e^{i\omega t}\,dt, \quad (9)$$

$$F_{zz} = \frac{1}{2}(F_{ii} + F_{ee} - 2F_{ei}). \quad (10)$$

Результаты расчета ДСФ[1)] для слабонеидеальной плазмы (рис. 2) в области $\omega = \omega_p$ хорошо согласуются с теоретической кривой, полученной из выражений (5), (7).

Высокочастотная часть ДСФ допускает аппроксимацию степенной зависимостью $S(\omega, k) \sim \omega^{-9/2}$. Данная асимптотика, вообще говоря, определяется короткодействующей частью потенциала взаимодействия. Поскольку она согласуется с теоретическим расчетом для кулоновского потенциала [18], можно сделать вывод о том, что короткодействующая часть использованного в МД-потенциала Кельбга [34] не вносит существенного вклада в ДСФ.

3.3. Дисперсия частоты и декремента затухания

Данные о дисперсии и декременте затухания ленгмюровских плазменных волн можно получить

1) ДСФ приводится с точностью до нормировочного множителя, поскольку в дальнейшем нас будет интересовать только ширина и положения пика вблизи плазменной частоты.

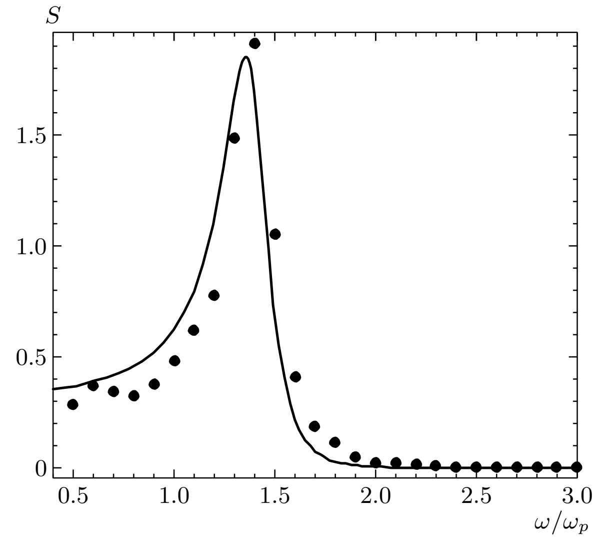

Рис. 2. Динамический структурный фактор: точки — МД-расчет, кривая — теория идеальной плазмы (5)–(7). $\Gamma = 0.26$, $N_D = 1.5$, $kr_D = 0.48$

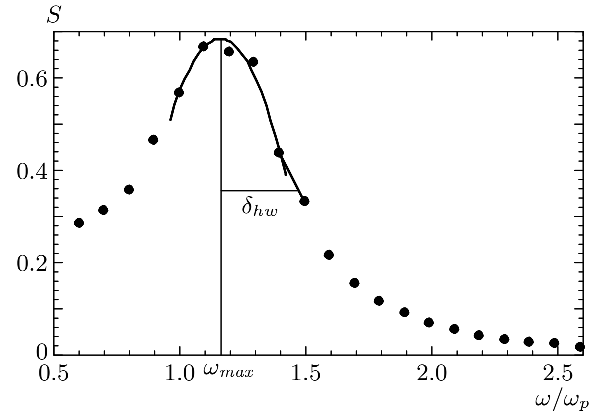

Рис. 3. Определение положения ω_{max} пика ДСФ и его полуширины δ_{hw} по результатам МД-моделирования (точки)

из анализа пика ДСФ вблизи плазменной частоты. Для этого применяется процедура, проиллюстрированная на рис. 3. Область пика аппроксимируется параболой. Погрешность определяется процедурой аппроксимации.

Полученные из интерполяции положение пика ω_{max} и его высота $S_{max} = S(\omega_{max}, k)$ (рис. 3) используются для определения полуширины δ_{hw} на полувысоте. При этом берется правая полуширина пика, поскольку слева от максимума кривая несколько искажается под влиянием ионно-звукового максимума на частоте $\Omega_i = \omega_p\sqrt{m/M} \ll \omega_p$ (не показан на графике). Для нахождения точки пересечения горизонтальной линии $S = S_{max}/2$ с МД-кривой используется дополнительная линейная интерполяция.

Заметим, что полуширина δ_{hw} максимума ДСФ, построенного по формулам (5), (7) с эффективной частотой столкновений $\nu = 2\delta$, хорошо согласуется с величиной δ в области $\delta < 0.8$. Поэтому величину δ_{hw} будем использовать для определения декремента затухания также и в неидеальной плазме.

Зависимости положения пика ДСФ ω_{max} и его полуширины δ_{hw} от волнового числа показаны на рис. 4, 5. Поскольку спектр значений k в МД-расчете дискретен и ограничен снизу для фиксированного N, проведены расчеты с различными N. Согласие расчетов для одного и того же k при различных N говорит о том, что граничные условия не влияют на результаты расчета, т. е. размеры МД-ячейки L выбраны верно по отношению к радиусу экранирования.

Характер зависимостей $\delta(k)$ и $\delta_{hw}(k)$, приведенных на рис. 4*а*, 5*а*, при больших k показывает, что затухание Ландау не претерпевает существенных изменений при переходе к неидеальной плазме. В пределе $k \to 0$ затухание Ландау стремится к нулю, и декремент затухания определяется только столкновительной частью $\delta_c = \nu/2$. Для определения эффективной частоты столкновений ν использовалась модель диэлектрической проницаемости (5), в которой величина ν рассматривалась как свободный параметр. Как видно из рисунков, при соответствующем выборе ν теоретические кривые хорошо аппроксимируют МД-данные.

Обратимся теперь к зависимости положения ω_{max} пика ДСФ от волнового числа k (рис. 4*б*, 5*б*). Дисперсия $\omega_0(k)$, найденная по формулам (5)–(7) для идеальной плазмы ($\nu = 0$), показана на рисунках штриховой линией. В бесстолкновительной плазме $\omega_0(k)$ совпадает с положением максимума ДСФ $\omega_{max}(k)$. При значениях ν, о которых сказано выше, максимум ДСФ может существенно смещаться в область меньших частот, т. е. значение $\omega_{max}(k)$ может не совпадать с нулем функции $\varepsilon(\omega_0 - i\delta, k) = 0$, определяющим дисперсию $\omega(k)$. На рис. 6 представлен пример для $\nu = 0.8$, при котором нуль функции $\varepsilon(\omega_0 - i\delta, k)$ заметно смещен в мнимую область, а так как ДСФ определен на действительной оси ω, то $\omega_{max} < \omega_0$.

Используя полученные ранее значения ν, представленные на рис. 4*а*, 5*а*, можно аналитически определить смещение пика ДСФ относительно $\omega(k)$ и построить кривые $\omega_{max}(k)$ с учетом этого эффекта. Эти кривые показаны на рис. 4*б*, 5*б* сплошны-

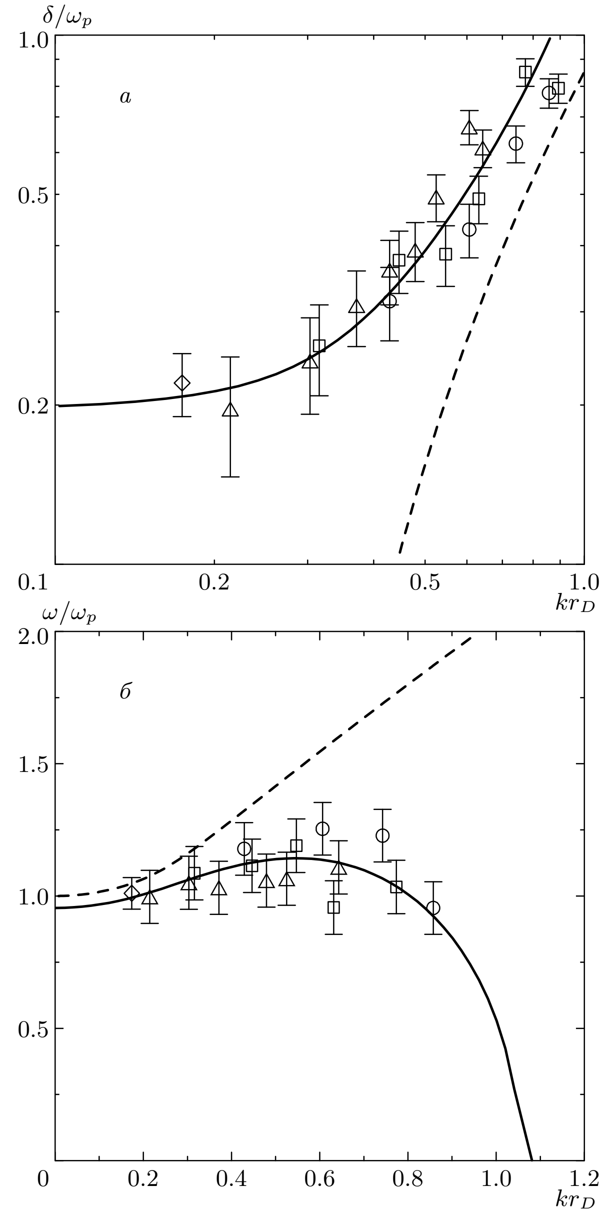

Рис. 4. Полуширина (a) и положение ($б$) пика ДСФ для $\Gamma = 1.28$ ($N_D = 0.13$): точки — результаты МД для различного числа частиц $N = 3000$ (ромб), 800 (треугольники), 500 (квадраты), 200 (кружки); штриховая кривая: затухание Ландау δ_L (a), дисперсия ($б$), найденные по формулам (5)–(7) при $\nu = 0$, сплошная кривая — полуширина (a) и положение ($б$) пика ДСФ при $\nu = 0.42$, полученные из выражений (5)–(7)

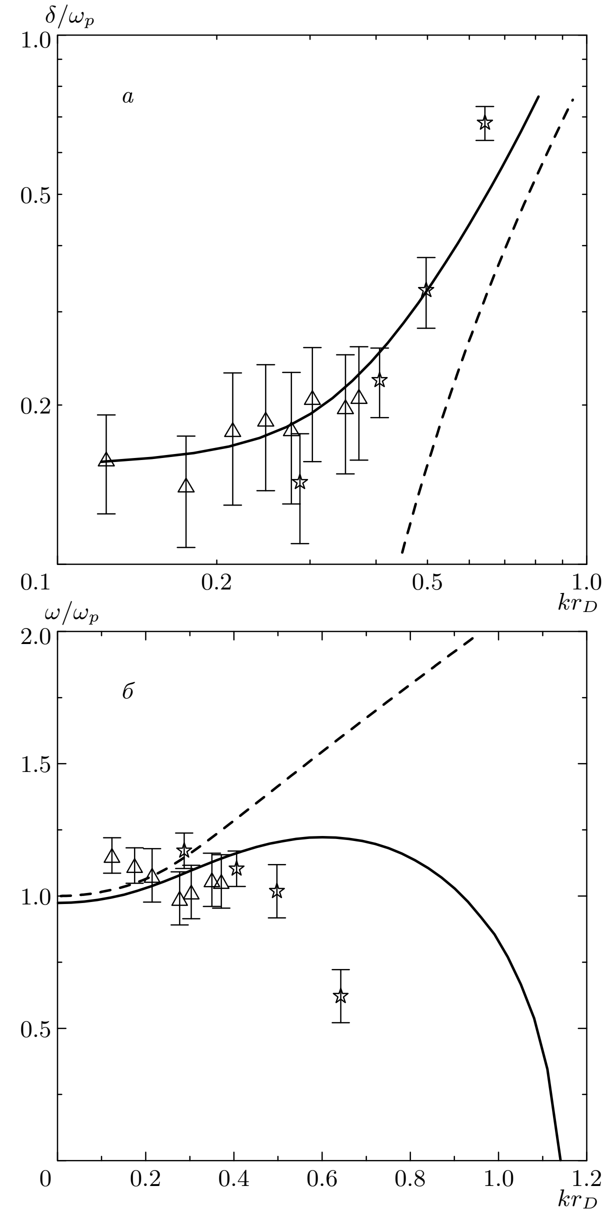

Рис. 5. Полуширина (a) и положение ($б$) пика ДСФ для $\Gamma = 3.84$ ($N_D = 0.026$): точки — результаты МД для $N = 800$ (треугольники), 128 (звездочки), кривые соответствуют рис. 4 (сплошная кривая — при $\nu = 0.32$)

ми линиями. Расчеты показывают, что при $\Gamma < 3$ ($N_D > 0.04$) теоретические кривые хорошо согласуются с данными МД (рис. 4*б*). Это свидетельствует о том, что в неидеальной плазме дисперсия практически совпадает с $\omega_0(k)$, а отрицательная дисперсия имеет место только для положения пика ДСФ $\omega_{max}(k)$ при относительно больших ν.

При $\Gamma = 3.84$ расчетная кривая и данные МД, представленные на рис. 5*б*, плохо согласуются между собой, что говорит о качественном отличии дисперсии в сильнонеидеальной плазме от результатов модели (5) при $\Gamma > 3$ ($N_D < 0.04$).

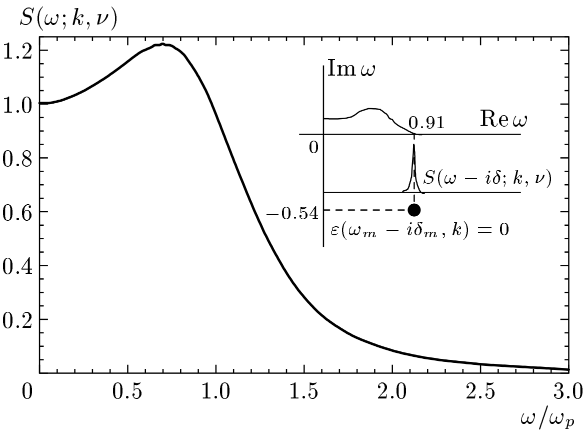

Рис. 6. Динамический структурный фактор (5)–(7) при $\nu/\omega_p = 0.8$, $kr_D = 0.2$. На вставке проиллюстрировано смещение максимума ДСФ относительно нуля диэлектрической проницаемости вследствие сильного затухания

Таким образом, результаты МД показывают, что, зная эффективную частоту столкновений ν, можно расширить область применимости хорошо известных формул теории идеальной плазмы [9, 22, 24] в область неидеальности при $\Gamma < 3$. Отметим недавнее прямое экспериментальное наблюдение плазменных волн в ультрахолодной невырожденной неидеальной плазме [30].

3.4. Коллективные степени свободы

Существование плазменных волн в идеальной плазме было использовано Бомом [41] для введения коллективных переменных или коллективных степеней свободы. Доля таких степеней свободы в идеальной плазме оказалась порядка $1/r_D$, т. е. очень малой. Оценки [14] показали, что доля коллективных степеней свободы увеличивается с ростом неидеальности и достигает насыщения около 1/3 при $N_D \approx 1$. Подход, развитый в настоящей работе, позволяет обосновать переход к описанию неидеальной плазмы в терминах коллективных переменных. При этом потребуется определить предельное значение k для дисперсии пламенных волн, а не максимума ДСФ k_{max}, рассмотренного в настоящей работе. Смещение максимума ДСФ в область меньших частот приводит к исчезновению этого максимума при $\omega_{max}(k_{max}) = 0$ (рис. 4*б*, 5*б*). В неидеальной плазме величина k_{max} оказывается меньше максимально допустимого k, определяемого условием $\delta(k) = \omega(k)$. Таким образом, плазменные волны могут существовать при $k > k_{max}$, но использованный метод пока не позволяет находить их частоту и декремент затухания.

С увеличением неидеальности, $\Gamma \gtrsim 2$, начинает уменьшаться как столкновительное затухание, так и область существования затухания Ландау, что согласуется с оценками работы [14]. Таким образом, при дальнейшем увеличении Γ коллективные степени свободы становятся лучше определенными. Это позволяет рассчитывать на то, что коллективные переменные окажутся хорошим подходом для построения теории неидеальной плазмы.

4. СТОЛКНОВЕНИЯ В РАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

В неидеальной плазме, в отличие от идеальной, эффективная частота столкновений может быть определена несколькими способами, т. е. можно говорить не об одной, а о нескольких эффективных частотах.

4.1. Столкновительное затухание ленгмюровских волн

Зависимость $\nu = 2\delta_c$ от параметра неидеальности приведена ниже на рис. 10 в п. 4.5. Точки проходят через максимум при $\Gamma \approx 2$ ($N_D \approx 0.07$), оставаясь при этом меньше плазменной частоты. Такое поведение обусловлено изменением характера столкновений. В неидеальной плазме экранирование происходит уже на среднем межчастичном расстоянии, которое уменьшается с ростом Γ при постоянной температуре. Соответственно уменьшается и эффективное сечение соударений. При $\Gamma \ll 1$ результаты МД согласуются с теорией Ландау (4).

4.2. Автокорреляционные функции

Автокорреляционные функции различных величин определяются в МД-расчетах, поскольку эти функции позволяют, используя формулы теории линейного отклика, найти свойства равновесных систем, в частности, проводимость равновесной плазмы. Зависимость проводимости от волнового числа существенна лишь в том случае, когда длина волны λ излучения, взаимодействующего с плазмой, становится сравнимой с радиусом экранирования r_D. Поскольку в большинстве экспериментальных работ $\lambda \gg r_D$, в настоящей работе мы ограничимся длинноволновым пределом $k \to 0$ и в последующих формулах не будем явно указывать зависимость от k.

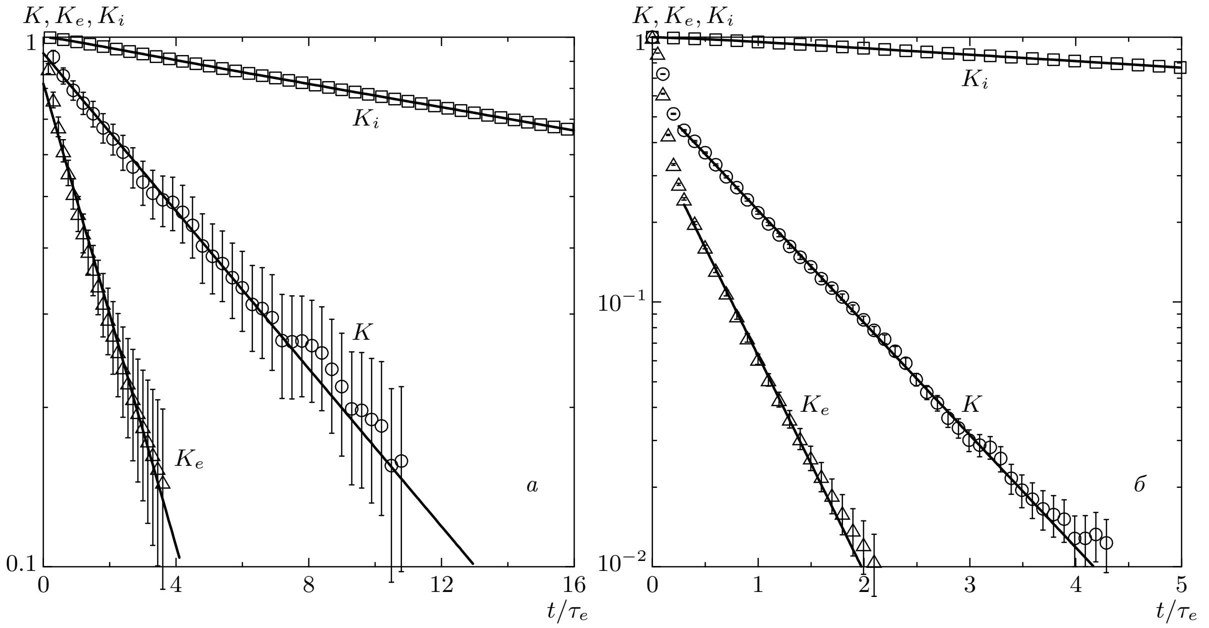

Рис. 7. Автокорреляционные функции скоростей электронов $K_e(t)$, ионов $K_i(t)$ и тока $K(t)$; *а* — $\Gamma = 0.13$ ($N_D = 4.2$); *б* — $\Gamma = 1.28$ ($N_D = 0.13$); $M/m = 100$

Рассматривая внутреннее электрическое поле плазмы как возмущение, а плотность тока частиц $\mathbf{J}$ как отклик среды, «внутреннюю» проводимость плазмы σ можно связать с равновесными флуктуациями тока [23]:

$$\sigma(\omega) = \beta\Omega_0 \langle J^z; J^z\rangle_{\omega+i\eta}, \tag{11}$$

где Ω_0 — объем системы, $\beta = 1/k_BT$, $\langle J^z; J^z\rangle_{\omega+i\eta}$ — спектральная корреляционная функция z-компоненты тока:

$$\langle \mathbf{J}; \mathbf{J}\rangle_{\omega+i\eta} = \int\limits_0^\infty \exp\left[i(\omega+i\eta)t\right] \langle \mathbf{J}(t)\mathbf{J}(0)\rangle\, dt. \tag{12}$$

Величина η требуется в теории для устранения расходимостей и устремляется к нулю после термодинамического предельного перехода. В МД-расчетах эти трудности не возникают. Для МД-системы среднюю плотность тока можно найти непосредственно из скоростей электронов и ионов:

$$\mathbf{J}(t) = \frac{1}{\Omega_0}\sum_{i=1}^N e_i\mathbf{v}_i(t). \tag{13}$$

Для удобства анализа результатов определим безразмерную корреляционную функцию и ее фурье-преобразование:

$$K(t) = \frac{\langle \mathbf{J}(t), \mathbf{J}(0)\rangle}{\langle J^2\rangle}, \tag{14}$$

$$\widetilde{K}(\omega) = \frac{4\pi\beta\Omega_0}{\omega_p}\langle J^z; J^z\rangle_\omega = \omega_p \int\limits_0^\infty \exp[i(\omega)t]K(t)\, dt. \tag{15}$$

При определении коэффициентов мы воспользовались выражением для среднеквадратичных флуктуаций тока с учетом изотропии плазмы:

$$\begin{gathered} \langle J\rangle = \frac{e^2}{\Omega_0^2}N\langle v^2\rangle = \frac{3\omega_p^2}{4\pi\Omega_0\beta}, \\ \langle J^z; J^z\rangle_\omega = \frac{1}{3}\langle \mathbf{J}; \mathbf{J}\rangle_\omega. \end{gathered} \tag{16}$$

В МД-моделировании автокоррелятор $K(t)$ вычисляется из выражения (13), взятого в различные моменты времени. Усреднение проводится по $I = 2000$–50000 начальным конфигурациям, из которых не менее 200–5000 конфигураций статистически независимы. Выбор числа усреднений определяется быстродействием используемой вычислительной системы. Фурье-преобразование (15) выполняется численно. Результаты для автокоррелятора тока $K(t)$, а также для автокорреляторов скоростей электронов и ионов,

$$K_c(t) = \frac{\langle \mathbf{v}_c(t)\mathbf{v}_c(0)\rangle}{\langle \mathbf{v}_c^2\rangle}, \quad c = e, i, \tag{17}$$

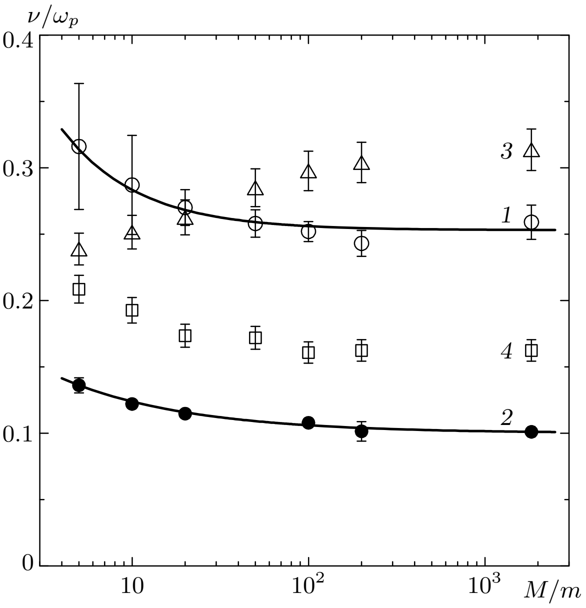

Рис. 8. Зависимости от массы ионов: эффективных частот столкновений $\nu(0)$ для $\Gamma = 1.28$, $N_D = 0.13$ (*1*) и $\Gamma = 3.84$, $N_D = 0.026$ (*2*), показатели экспоненциального затухания автокорреляторов скоростей электронов ν_e (*3*) и автокорреляторов токов ν_j (*4*) для $\Gamma = 1.28$; аппроксимация $\nu(M) = \nu(\infty)(1 + B(M/m)^{-\xi})$ — сплошные линии

представлены на рис. 7. Видно, что каждый автокоррелятор на рис. 7*б* имеет начальный участок длительностью $t \approx 0.2\tau_e$ и последующий экспоненциальный спад. При уменьшении степени неидеальности характер затухания $K(t)$ все больше приближается к экспоненциальному и при $\Gamma = 0.13$ уже хорошо аппроксимируется зависимостью $K(t) = \exp(-\nu_j t)$. Появление начального участка, таким образом, является эффектом неидеальности плазмы.

4.3. Зависимость от массы ионов

Зависимости показателей экспоненты для автокорреляторов скоростей электронов $K_e(t) = \exp(-\nu_e t)$ и тока $K(t) = \exp(-\nu_j t)$ от отношения масс M/m показаны на рис. 8. Показатели экспонент ν_e и ν_j практически не зависят от отношения масс, поэтому $M/m = 100$ является достаточно хорошим приближением для изучения динамики электронной компоненты в реальной плазме. Эффективная частота столкновений $\nu(0)$, о которой будет сказано ниже, также перестает зависеть от M при $M/m > 100$.

Зависимость показателя экспоненты для автокорреляторов $K_i(t) = \exp(-\nu_i t)$ скоростей ионов ν_i от массы ионов, как показали расчеты, аппроксимируется степенной зависимостью $\nu_i \propto (M/m)^{-\alpha}$. Величина α может отличаться от предполагаемого значения $\alpha = 0.5$, следующего из выражения для тепловой скорости ионов $v_{T,i} \propto 1/\sqrt{M}$. Результаты МД дают значения $\alpha = 0.6 \pm 0.04$ для $\Gamma = 1.28$, $\alpha = 0.5 \pm 0.04$ для $\Gamma = 3.84$.

4.4. Проводимость

Перейдем теперь к результатам для статической проводимости неидеальной плазмы. Эта область является достаточно хорошо изученной как теоретически [12, 16, 20, 42–46], так и экспериментально (см., например, обзоры в работах [12, 21, 39]). Однако здесь существуют некоторые трудности. В работах [20, 42] проанализирован большой объем экспериментальных данных по проводимости для различных веществ, плотностей и температур. Выделена кулоновская часть проводимости, которая представлена на рис. 9 в зависимости от параметра неидеальности

$$\gamma = \frac{e^2(n_e + n_i)^{1/3}}{k_B T} \approx \frac{\Gamma}{1.28}.$$

Кривые *1* и *3*, рассчитанные по формулам идеальной плазмы, оказались выше всего массива экспериментальных данных. Оценка проводимости для равновесной плазмы, выполненная в работах [12, 43], показана на рис. 9 кривой *4*.

Как видно на рисунке, в результатах различных экспериментов (закрашенные точки) наблюдается большой разброс, в то время как любая теория для равновесной плазмы дает однозначную зависимость $\sigma(\gamma)$. В работе [44] сделано предположение о том, что в неидеальной плазме существенную роль может играть рассеяние электронов на коллективных модах, причем в лабораторной плазме эти моды могут быть возбуждены до надтеплового уровня. В этом случае проводимость неравновесной неидеальной плазмы должна оказаться меньше проводимости равновесной плазмы. Практически весь массив экспериментальных данных оказался ниже кривой *4*, что свидетельствует о той или иной степени неравновесности в экспериментах. Горизонталь *5* соответствует максимальному уровню возбуждения плазменных волн [43]. В этой области лежат, например, данные экспериментов [47].

Результаты настоящей работы показаны на рис. 9 незакрашенными треугольниками. Проводимость определялась по формуле (11) из автокорреляторов тока (13). Как видно из рисунка, эти

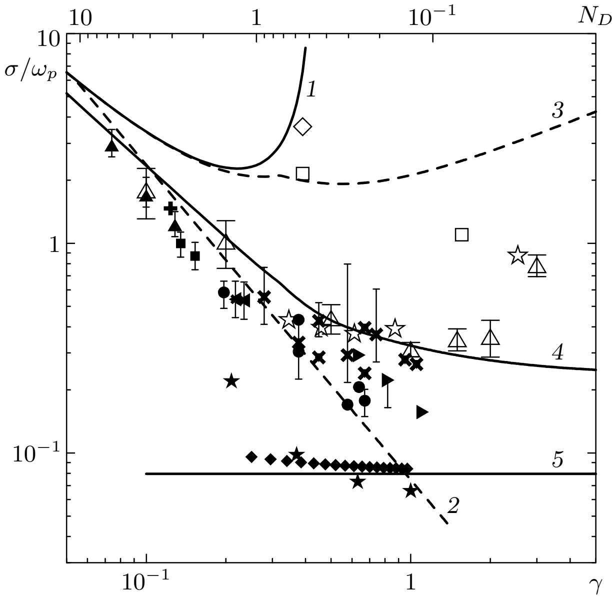

Рис. 9. Статическая проводимость в зависимости от параметра неидеальности $\gamma = e^2(n_e + n_i)^{1/3}/k_BT \approx \Gamma/1.28$. Закрашенные точки — данные различных экспериментов (в том числе ромбы — [47]); незакрашенные точки — результаты МД: треугольники — настоящая работа, ромб и квадраты — [16], звездочки — данные аналитических расчетов [48]. Теоретические кривые: *1* — формула Ландау, *2* — то же при $L_e = 3$, *3* — то же при $L_e = \sqrt{\Lambda^2+1}/2$, $\Lambda = r_D/r_L$ [14], *4* — расчет [43], *5* — $\sigma = \omega_p/4\pi$

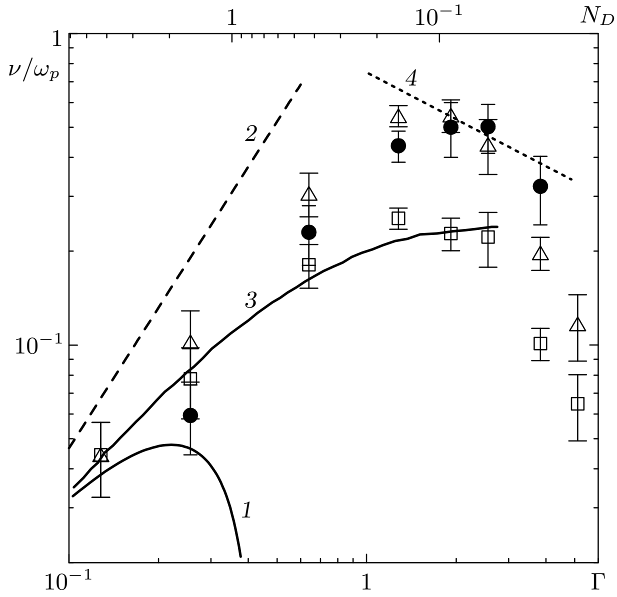

Рис. 10. Эффективная частота столкновений, полученная различными способами: квадраты — $\nu(0)$ из автокоррелятора тока на частоте $\omega = 0$, треугольники — то же при $\omega = \omega_p$, кружки — из декремента затухания ленгмюровских волн $2\delta_c$, *1* — теория идеальной плазмы, *2* — то же при $L_e = 3.2$, *3* — данные [50], *4* — асимптотика [14] для $\Gamma > 1$

результаты хорошо согласуются с оценками [12, 43] (кривая *4*) при $\gamma < 2$ ($\Gamma < 2.5$, $N_D > 0.03$). Таким образом, теория [43] и результаты МД, полученные в настоящей работе, взаимно подтверждают друг друга. Хорошее согласие получено также с результатами независимых расчетов [48], выполненных в рамках жидкометаллической модели.

4.5. Эффективная частота столкновений

Определением для эффективной частоты столкновений $\nu(\omega)$ служит обобщенная формула Друде для проводимости σ или соответствующее выражение для диэлектрической проницаемости ε:

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi}\,\frac{1}{\nu(\omega) - i\omega}\,, \tag{18}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i\sigma(\omega)}{\omega} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu(\omega))}\,. \tag{19}$$

Термин «частота столкновений» не следует понимать буквально, это лишь удобная характеристика столкновительных процессов в плазме. В теории идеальной плазмы ν имеет вид (4) и не зависит от частоты возмущения. Такое приближение, как показано ниже, оказывается неверным в случае неидеальной плазмы. Однако, если взять в качестве $\nu(\omega)$ комплексную величину, зависящую от частоты возмущающего поля ω [11, 49], то формулы (18), (19) будут выражать лишь алгебраическую связь $\nu(\omega)$ с $\sigma(\omega)$ и $\varepsilon(\omega)$, не накладывая никаких ограничений, связанных с теорией Друде.

Рассмотрим сначала статический предел. На нулевой частоте величина $\nu(0)$ обратно пропорциональна интегралу (15). Для идеальной плазмы она совпадает с показателем экспоненциального затухания автокоррелятора тока ν_j, а для неидеальной оказывается несколько больше ν_j из-за неэкспоненциального участка затухания в начале зависимости $K(t)$.

Зависимость $\nu(0)$ от параметра неидеальности приведена на рис. 10 в сравнении с теорией Ландау [9]. При слабой степени неидеальности результаты МД хорошо согласуются с формулами для иде-

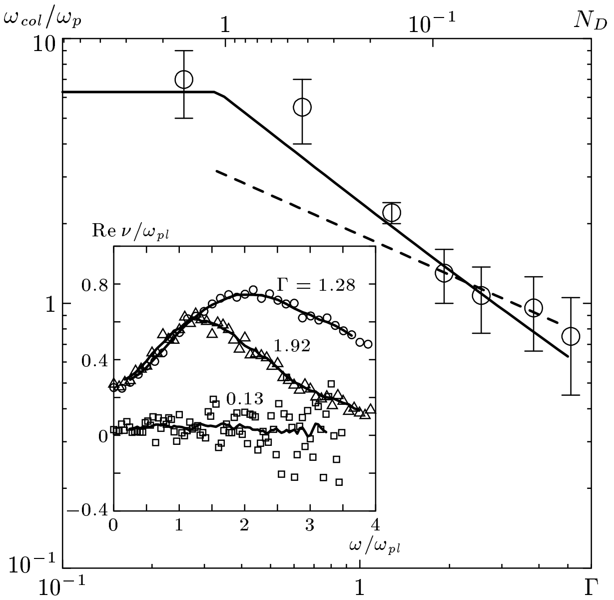

Рис. 11. Смещение максимума $\mathrm{Re}\,\nu(\omega)$ в область низких частот при увеличении неидеальности плазмы. Точки — положения максимума $\mathrm{Re}\,\nu(\omega)$ по результатам МД; качественные оценки ω_{col}, соответствующие оценкам времен столкновения (20) — штриховая линия, (22) — сплошная линия. На вставке: зависимости действительной части эффективной частоты столкновений ν от частоты возмущения при различной степени неидеальности. Сплошные кривые получены усреднением МД-данных (точек)

альной плазмы, однако экстраполяция этих формул в область неидеальности даже с фиксированным кулоновским логарифмом существенно завышает эффективную частоту столкновений. Наличие максимума и дальнейшего уменьшения $\nu(\Gamma)$ коррелирует с асимптотикой, приведенной в работе [14]. Слишком резкое уменьшение $\nu(\Gamma)$ может быть связано с погрешностями псевдопотенциальной модели, проявляющимися при больших плотностях. Результаты МД для $\nu(0)$ хорошо согласуются с независимыми расчетами [50] при $\Gamma < 3$.

Действительная часть динамической частоты столкновений ν представлена на вставке рис. 11 в зависимости от частоты возмущения. В идеальной плазме зависимость $\nu(\omega)$ практически отсутствует. Это видно также на рис. 10, где отличие динамической частоты столкновений, взятой на плазменной частоте $\nu(\omega_p)$, от статической $\nu(0)$ увеличивается с ростом Γ. Амплитуда максимума $\nu(\omega)$ связана с $\nu(0)$, поэтому вначале она увеличивается с ростом Γ, а затем начинает убывать.

Значения $\nu(\omega_p)$ хорошо согласуются со значениями $\nu = 2\delta_c$, где δ_c — декремент столкновительного затухания ленгмюровских волн (см. п. 4.1), что говорит о самосогласованности расчетной модели.

4.6. Зависимость $\nu(\omega)$

Возвращаясь к зависимости $\nu(\omega)$, необходимо отметить, что возникновение максимума эффективной частоты столкновений имеет простой физический смысл. Положение этого максимума в зависимости от степени неидеальности представлено на рис. 11. Для качественного объяснения рассматриваемой зависимости определим время столкновения τ_{col} как время взаимодействия электрона и иона внутри сферы экранирования радиуса r_s:

$$\tau_{col} = \frac{2r_s}{v_T}, \qquad (20)$$

где $v_T = \sqrt{3k_BT/m}$ — тепловая скорость электронов.

В идеальной плазме величина r_s определяется дебаевской длиной r_D. Однако при $\Gamma > 1/3$ этот параметр теряет смысл, так как становится меньше среднего межчастичного расстояния $a = \sqrt{3\Gamma}r_D$. Согласно [33] в этом случае экранирование должно происходить на среднем расстоянии a, а не на дебаевской длине r_D. Это подтверждается расчетами бинарной корреляционной функции электрон-ионного распределения, показанной на рис. 12. Бинарные корреляционные функции в данном случае рассчитывались по достаточно длинной равновесной МД-траектории $T = (200\text{–}1000)\tau_e$, на которой выбиралось $I = 5000\text{–}20000$ конфигураций частиц, с последующим усреднением.

Времени τ_{col} соответствует некоторая частота $\omega_{col} = \tau_{col}^{-1}$. Для идеальной плазмы она не играет существенной роли, ввиду того что близкие столкновения являются сравнительно редкими. При увеличении роли близких столкновений можно ожидать появления резонансного поглощения на частоте $\omega = \omega_{col}$.

Подставим радиус экранирования

$$r_s = \begin{cases} -r_D, & \Gamma < 1/3, \\ -a, & \Gamma \geqslant 1/3 \end{cases} \qquad (21)$$

в выражение (20). Для неидеальной плазмы ($\Gamma \geqslant 1/3$) получаем $\omega_{col}/\omega_p \sim \Gamma^{-1/2}$ (рис. 11), что качественно соответствует результатам МД.

Более точный расчет ω_{col} требует интегрирования уравнений движения электрона внутри

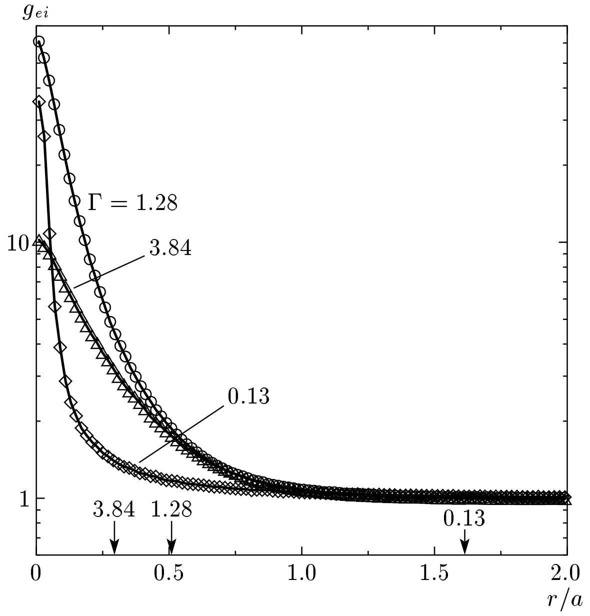

Рис. 12. Бинарные корреляционные функции электрон-ионного распределения; a — среднее межчастичное расстояние. Стрелками показаны значения дебаевской длины r_D для различной степени неидеальности

сферы экранирования под воздействием центрально-симметричного поля иона [34]:

$$\tau_{col} = 2\int_{r_{min}}^{r_s} \frac{dr}{\sqrt{\dfrac{2}{m}\left(E - \dfrac{mv_T^2 r^2}{2\rho^2} - V_{ei}(r)\right)}}, \qquad (22)$$

где $E = mv_T^2/2$ — энергия электрона на бесконечности, ρ — прицельный параметр, выбираемый так, чтобы время τ_{col} было максимальным, r_{min} — расстояние максимального сближения электрона и иона. Результат расчета для $\omega_{col} = \tau_{col}^{-1}$ показан на рис. 11 сплошной линией. Хорошее согласие с результатами моделирования подтверждает правильность предложенной интерпретации.

Указанные соображения дают лишь качественное объяснение зависимости $\nu(\omega)$. Более последовательное теоретическое исследование приведено в работе [49].

5. РЕЛАКСАЦИЯ ЭНЕРГИИ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

5.1. Общая картина релаксации

В большинстве экспериментов сразу после процесса ионизации возникающая плазма является существенно неравновесной. Характер неравновесности зависит от условий эксперимента. В плазме, образованной на фронте ударной волны, температура ионов существенно превышает электронную. Ионизация мишеней короткими лазерными импульсами приводит, наоборот, к разогреву электронной компоненты при относительно холодных ионах. Имеющиеся экспериментальные данные говорят о том, что теория идеальной плазмы перестает работать уже при значениях параметра неидеальности $\Gamma \approx 0.2$ ($N_D \approx 2$).

В настоящей работе рассмотрена релаксация энергии в плазме для нескольких типов начальной неравновесности, при которых одна или обе подсистемы находятся при нулевой температуре. Это соответствует трем предельным случаям: $T_e \ll T_i$ (плазма за фронтом ударной волны), $T_e \gg T_i$ (лазерный нагрев плазмы) и $T_e = T_i = 0$ (методический пример). В случае $T_e \gg T_i$ рассматриваются два варианта начального пространственного распределения ионов: кристаллическая решетка и распределение, взятое из равновесной МД-траектории.

Для создания ансамбля неравновесных состояний используется процедура, описанная в работе [37]. На первом этапе рассчитывается достаточно длинная равновесная МД-траектория. На полученной траектории выбирается $I = 50$–200 статистически независимых состояний, в каждом из которых равновесие затем нарушается путем принудительной остановки электронов, ионов или всех частиц. При использовании кристаллической решетки равновесная траектория рассчитывается с неподвижными ионами.

Характер протекания релаксации проиллюстрируем для случая, когда в начальный момент остановлены и электроны, и ионы (рис. 13). Этот пример подчеркивает, что, в отличие от идеальной, в неидеальной плазме к столкновительной релаксации добавляется процесс установления равновесия между средней кинетической энергией $T = (T_e + T_i)/2$ (кривая *2*) электронов и ионов и потенциальной энергией взаимодействия U. Полная энергия сохраняется в процессе расчета, $2T + U = \text{const}$. При этом на начальном этапе процесс может носить колебательный характер. В идеальной плазме $U = 0$.

На первом участке происходит резкий нагрев

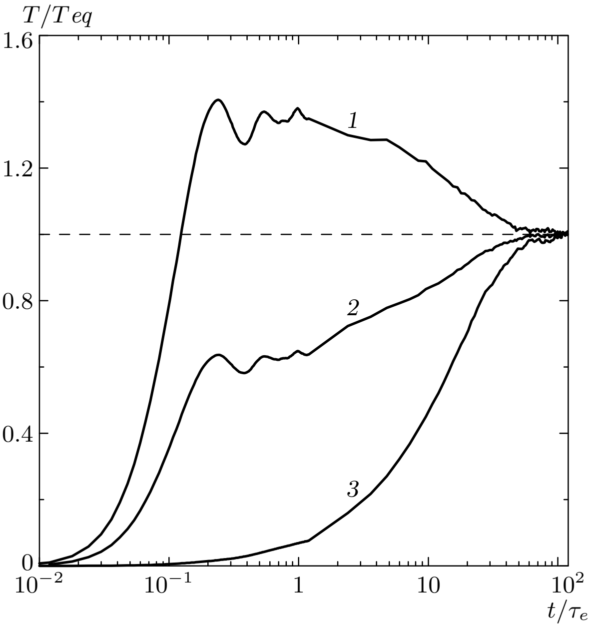

Рис. 13. Релаксация кинетической энергии электронов T_e (*1*), ионов T_i (*3*) и средней кинетической энергии T (*2*) к равновесной T_{eq}; $\Gamma = 3.3$, $M/m = 100$

электронов (рис. 13) и их максвеллизация, т. е. установление равновесного распределения по энергиям с температурой, равной двум третям средней кинетической (рис. 14). Например, для отношения масс $M/m = 100$, $\Gamma = 3.3$ ($N_D = 0.03$) распределение по скоростям принимает вид масквелловского с температурой, соответствующей средней кинетической энергии частиц, для электронов за время порядка τ_e (рис. 14*a*), для ионов — за $15\tau_e$. После этого имеет место электрон-ионная релаксация в двухтемпературной системе. Этот процесс проходит на фоне продолжающейся перекачки потенциальной энергии в кинетическую, поскольку последняя продолжает расти (кривая *2* на рис. 13). Заметим, что при этом на хвосте распределения ионов по скоростям ($E > 2k_BT$) сохраняется небольшое превышение над распределением Максвелла.

Таким образом, можно выделить два характерных времени — время τ_{nB} начальной неэкспоненциальной релаксации разности кинетических энергий электронов и ионов $\Delta T = |T_e - T_i|$ и время τ_B, характеризующее последующий экспоненциальный спад разности температур $\Delta T \propto \exp(-t/\tau_B)$. Затухание по экспоненциальному закону разности ΔT начинается раньше, чем устанавливается максвелловское распределения для ионов. Например, на рис. 13 это происходит на временах $t \approx 5\tau_e$.

Другие примеры зависимостей энергий электронов и ионов от времени рассмотрены в работах [37, 51]. Здесь мы остановимся на характерных временах релаксации τ_{nB} и τ_B, соответственно, неэкспоненциальной и экспоненциальной стадий, зависимости которых от Γ не были рассмотрены в работах [37, 51].

5.2. Длительность неэкспоненциальной релаксации

На рис. 15 показана зависимость длительности неэкспоненциального участка τ_{nB} от параметра неидеальности для трех типов начальных условий: $T_i(0) = 0, T_e(0) = 0$ и $T_e(0) = T_i(0) = 0$. Времена τ_{nB} во всех трех случаях оказались хотя и различными, но достаточно близкими — разброс не превысил одного порядка величины. Независимо от начальных условий время τ_{nB} возрастает с увеличением Γ.

Для того чтобы пояснить физический смысл времени τ_{nB}, вспомним уравнение, описывающее релаксацию разности температур электронов и ионов в идеальной плазме, приведенное, например, в статье [25]:

$$\frac{d\Delta T}{dt} = -\nu_{ei}^{\varepsilon}\Delta T. \qquad (23)$$

Здесь характерное время релаксации $\tau_{ei} = (\nu_{ei}^{\varepsilon})^{-1}$ определяется электрон-ионными столкновениями

$$\tau_{ei} = \frac{3}{8}\,\frac{(mT_i + MT_e)}{\sqrt{2\pi mM}}\,\frac{1}{Z(Z+1)e^4 n_e L_e}. \qquad (24)$$

Решение уравнения (23) не может описать начальную неэкспоненциальную релаксацию. Поскольку (23) получено из решения кинетического уравнения, базирующегося на предположении о стохастичности системы и статистической независимости отдельных столкновений частиц, можно предположить, что оно справедливо только на временах $t > t_{me}$, где t_{me} — время динамической памяти для электронов [38]. Как видно на рис. 15, длительность неэкспоненциального участка действительно во всех случаях оказывается одного порядка с временем динамической памяти t_{me}. Время t_m характеризует время, в течение которого динамическая траектория частиц «забывает» начальные условия, другими словами, t_m — это время, которое ограничивает справедливость решения задачи Коши для метода МД [38, 52]. Поэтому можно сделать вывод, что неэкспоненциальная стадия соответствует динамическому режиму релаксации, а последующая экспоненциальная — стохастическому. Не обнаружено

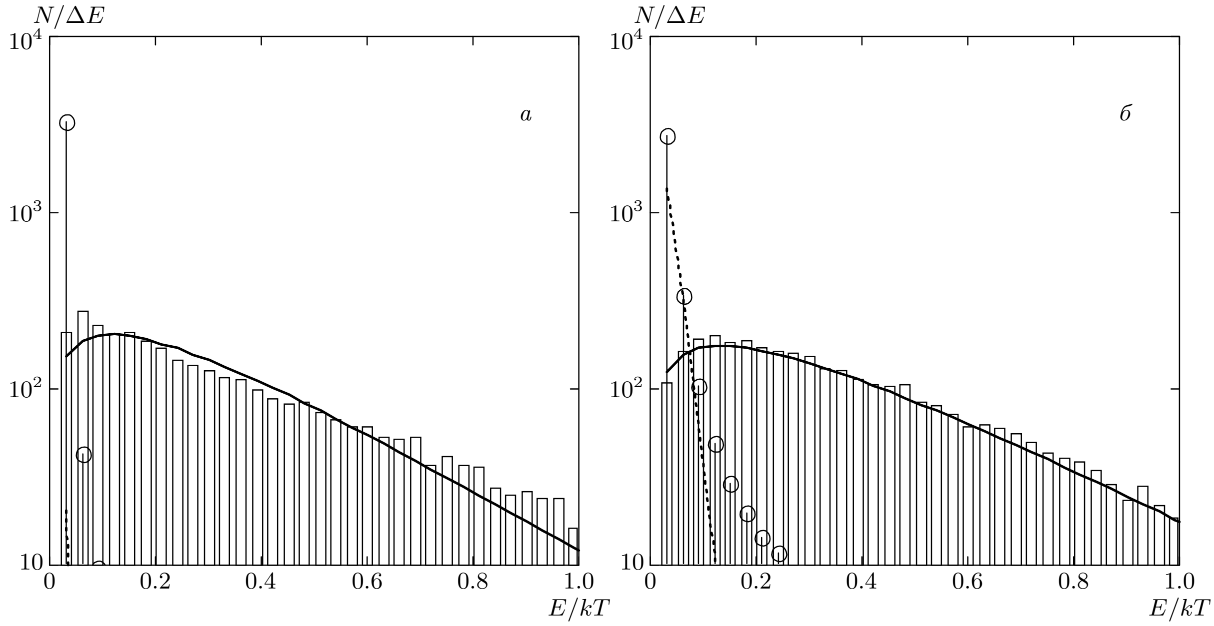

Рис. 14. Распределение электронов (столбцы) и ионов (кружки) по энергиям в различные моменты релаксации $t = 0.15\tau_e$ (*а*), $0.58\tau_e$ (*б*). Сплошные (штриховые) кривые соответствуют максвелловскому распределению для электронов (ионов) при температуре, соответствующей средней кинетической энергии электронов (ионов). $T_e(0) = T_i(0) = 0$, $\Gamma = 3.3$, $M/m = 100$

существенной зависимости времен τ_{nB} и t_m от M при $M/m > 100$. Неэкспоненциальная стадия релаксации становится несущественной в идеальной плазме при $\Gamma \to 0$.

5.3. Характерное время экспоненциальной релаксации

Рассмотрим теперь время τ_B. Зависимость τ_B от M/m отличается от линейной, как это было бы в случае идеальной плазмы, но может быть аппроксимирована степенной функцией $\tau_B \propto (M/m)^\alpha$ (рис. 16). Величины τ_B и α практически не зависят от типа начальной неравновесности. В пределе идеальной плазмы $\Gamma \to 0$ показатель $\alpha(\Gamma)$ стремится к теоретическому значению $\alpha = 1$, а в неидеальной плазме может быть аппроксимирован выражением

$$\alpha = 1 - 0.15\,\Gamma + 0.035\,\Gamma^2, \quad \Gamma < 4. \qquad (25)$$

Минимальное значение $\alpha = 0.84$ достигается при $\Gamma = 2.1$. Условно можно говорить об эффективной массе электронов в неидеальной плазме.

Для изучения зависимости τ_B от Γ удобно разделить переменные:

$$\tau_B(\Gamma, M) = \tau_B^1(\Gamma)\left(\frac{M}{m}\right)^{\alpha(\Gamma)}. \qquad (26)$$

Зависимость $\tau_B^1(\Gamma)$ представлена на вставке рис. 16. С помощью формулы (26) можно экстраполировать результаты для времени релаксации τ_B на любые значения M/m. Ошибка определения α не превышает 5 %, что дает, например, для алюминия ошибку определения τ_B порядка 40 %. Этого достаточно для оценки времени релаксации по порядку величины.

Как видно на рис. 16, нижняя пунктирная линия (экстраполяция теории идеальной плазмы [25] с фиксированным кулоновским логарифмом) может на несколько порядков превышать скорость релаксации энергии в неидеальной плазме при больших Γ. Это согласуется с результатами экспериментов по релаксации в ударно-сжатом алюминии и кремнии [4, 6]. Количественное сравнение затруднено из-за роли вырождения в условиях, рассмотренных в работах [4, 6].

Результаты для скорости релаксации энергии можно сопоставить с результатами для скорости релаксации импульса. Для идеальной плазмы характерные времена релаксации энергии, τ_B^{id}, и импульса, ν^{-1}, связаны простым соотношением [9, 25] (в приведенных единицах)

$$\tau_B^{id} = \frac{M}{m}\,\frac{3\Gamma^{-3/2}}{8\sqrt{6\pi}L_e} = \frac{M}{m}\,\frac{1}{\sqrt{8\pi}}\,\nu^{-1}. \qquad (27)$$

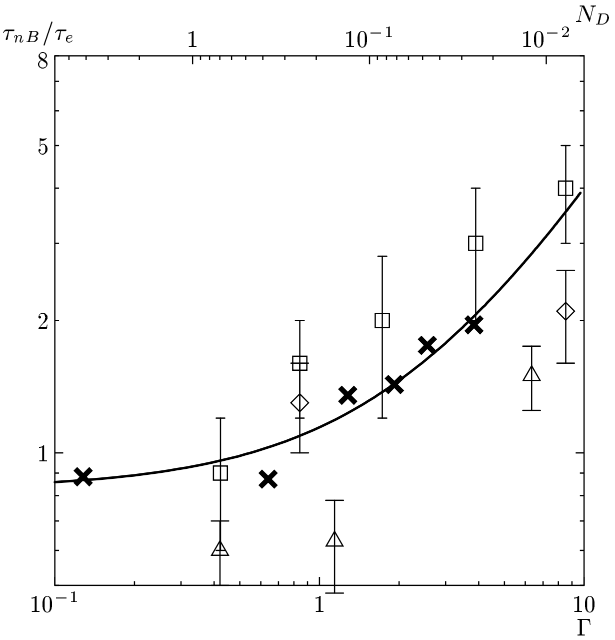

Рис. 15. Зависимости длительности неэкспоненциальной релаксации от параметра неидеальности при начальных условиях: $T_i(0) = 0$ — квадраты, $T_e(0) = 0$ — ромбы, $T_e(0) = T_i(0) = 0$ — треугольники. Крестиками отмечено время динамической памяти t_{me} для равновесной плазмы, кривая — линейная аппроксимация для t_{me}. $M/m = 100$

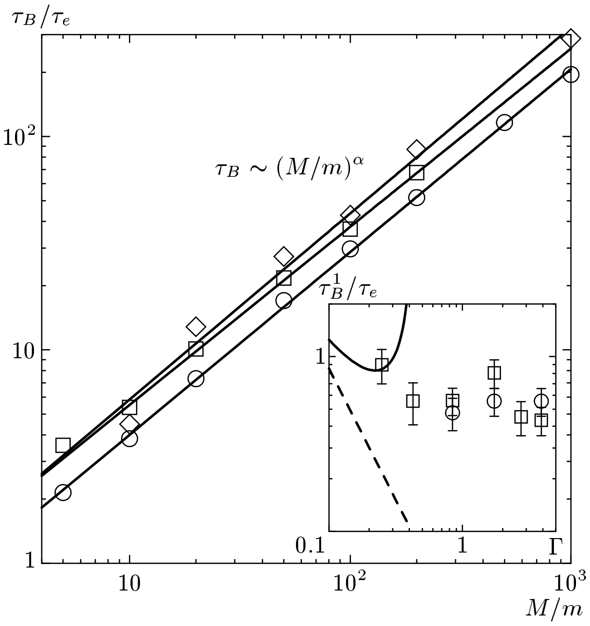

Рис. 16. Зависимости характерного времени экспоненциальной релаксации от массы ионов для $\Gamma = 3.3$ при начальных условиях: $T_e(0) = 0$ — ромбы, $T_i(0) = 0$ — квадраты, $T_i(0) = 0$, кристалл — кружки. Линиями показаны степенные аппроксимации. На вставке: зависимости от параметра неидеальности; сплошная кривая — теория Ландау, пунктирная — то же с фиксированным кулоновским логарифмом ($L_e = 3.2$)

В случае неидеальной плазмы, как следует из МД-расчетов, соотношение (27) уже не выполняется,

$$\tau_B^1 > \tau_B^* = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\,\nu^{-1}(0), \qquad (28)$$

где $\nu(0)$ — эффективная частота столкновений, найденная в п. 4. Величины τ_B^1 и τ_B^* в исследованной области параметра неидеальности различаются в 2–3 раза.

Таким образом, переход к неидеальной плазме приводит к появлению целого набора эффективных времен релаксации как в равновесном, так и в неравновесном случаях.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено МД-моделирование равновесной и неравновесной сильноионизованной невырожденной неидеальной плазмы в диапазоне параметра неидеальности $0.1 < \Gamma < 4$ ($4 > N_D > 0.03$) с использованием псевдопотенциальной модели Кельбга. Анализ найденных данных позволил получить следующие результаты.

Показано, что максимум динамического структурного фактора, соответствующий ленгмюровским плазменным волнам, существует во всем исследованном диапазоне параметра неидеальности. Определены дисперсия частоты и декремента затухания ленгмюровских волн. Обнаружено, что декремент затухания проходит через максимум при $\Gamma \approx 2$ ($N_D \approx 0.07$), оставаясь при этом в четыре раза меньше плазменной частоты. Таким образом, экстраполяция выражений, полученных для столкновительного затухания в теории идеальной плазмы, в область $\Gamma > 0.1$ ($N_D < 10$) с фиксированным L_e оказывается несправедливой. В то же время не выявлено существенных различий в описании затухания Ландау между идеальной и неидеальной плазмой в исследованной области параметров.

Показано, что выражение (5) для диэлектрической проницаемости [22] идеальной плазмы с модифицированной частотой столкновений может применяться для описания плазменных волн в неидеальной плазме до $\Gamma < 3$ ($N_D > 0.04$). Отмечено, что отрицательная дисперсия максимума динамического структурного фактора по частоте обусловлена смещением нуля диэлектрической проницаемости в мнимую область вследствие столкновительного затухания в неидеальной плазме. МД-результаты для $\Gamma > 3$ пока не получили теоретического описания.

Показано, что в неидеальной плазме, в отличие от идеальной, столкновения частиц не удается описать единственной эффективной частотой столкновений в рамках использованной теоретической модели. В частности, для равновесной плазмы найдены статическая ($\omega = 0$) частота столкновений и частота столкновений для возмущающего поля с $\omega = \omega_p$. Последняя определена двумя независимыми способами: из декремента затухания плазменных волн при малых k и из автокорреляционной функции токов. Согласие результатов между собой говорит о достоверности развиваемого подхода. Найдены зависимости частоты столкновений от ω для различных параметров неидеальности, и дано их качественное объяснение. Результаты для статической частоты столкновений согласуются с теорией идеальной плазмы при $\Gamma < 0.3$ ($N_D > 1.2$) и с асимптотическими оценками [14] при $\Gamma > 2$ ($N_D < 0.07$), а в переходной области $\Gamma \lesssim 2$ — с теоретическими расчетами [50].

Расчеты для модельных ионов малой массы показали, что найденные значения частот столкновений перестают зависеть от отношения масс ионов и электронов M/m при $M/m > 10^2$. Таким образом, найденные частоты столкновений и дисперсии ленгмюровских волн справедливы для любых реальных значений M/m. Рассчитана статическая проводимость неидеальной плазмы в области $4 > N_D > 0.03$. Проведено сопоставление с экспериментальными данными и другими теоретическими подходами.

Исследована релаксация энергии электронов и ионов для трех типов начальной неравновесности в неидеальной плазме ($T_e \ll T_i$, $T_e \gg T_i$, $T_e = T_i = 0$). Показано, что на протяжении всего процесса релаксации происходит установление равновесия между суммарной кинетической энергией электронов и ионов и энергией их взаимодействия друг с другом (в идеальной плазме этот процесс отсутствует). Установлено и другое отличие от идеальной плазмы — существование начального этапа релаксации, на котором разница кинетических энергий $\Delta T = |T_e - T_i|$ немонотонно зависит от времени. Эта зависимость не описывается кинетическим уравнением с эффективной частотой столкновений. Длительность τ_{nB} этого этапа коррелирует с величиной времени динамической памяти t_m для электронов — времени, в течение которого траектории электронов «забывают» свои начальные условия, т. е. стохастизируются. Для времен $t > \tau_{nB}$ величина ΔT уменьшается по экспоненциальному закону $\Delta T \propto \exp(-t/\tau_B)$, что свидетельствует о стохастическом характере этого этапа релаксации. Получены значения τ_B, предложена интерполяционная формула (26), позволяющая рассчитать время экспоненциальной релаксации для неидеальной плазмы с ионами произвольной массы. В отличие от идеальной плазмы зависимость $\tau_B(M) \sim (M/m)^{\alpha(\Gamma)}$ несколько отличается от линейной. Определен показатель $\alpha(\Gamma)$. Сомножитель $\tau_B^1(\Gamma)$, не зависящий от M/m, коррелирует с частотой столкновений в равновесной плазме ν, однако связь τ_B^1 и ν отличается от той, которая имеет место в идеальной плазме.

Анализ результатов МД для частот столкновений и времени релаксации говорит о том, что времена релаксации импульса и энергии в неидеальной плазме на несколько порядков превышают экстраполяционные оценки по теории Ландау. В случае релаксации импульса это непосредственно влияет на микроскопические свойства среды, такие как проводимость, диэлектрическая проницаемость, коэффициент отражения. Относительно большое время релаксации говорит о том, что эффекты, связанные с неравновесностью, такие, например, как надтепловое возбуждение плазменных волн [20], могут вносить существенный вклад в результаты измерений.

Благодарим участников семинаров А. С. Кингсепа, А. А. Рухадзе, В. Д. Шафранова за обсуждение и полезные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке по комплексной программе научных исследований Президиума РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий», межсекционной программе ОЭММПУ РАН «Информационно-компьютерные модели исследования фундаментальных проблем неравновесных сред», РФФИ (грант № 03-07-90272в). Расчеты проводились на вычислительном кластере, полученном по гранту Немецкой службы академических обменов (DAAD). М. И. В. выражает благодарность фонду «Династия» и Международному центру фундаментальной физики в Москве за финансовую поддержку. Выражаем благодарность рецензенту за замечания, которые помогли нам улучшить данную статью.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Н. Ломакин, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **63**, 92 (1972).

2. В. К. Грязнов, М. В. Жерноклетов, В. Н. Зубарев, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **78**, 573 (1980).

3. V. B. Mintsev and Yu. B. Zaporoghets, Contrib. Plasma Phys. **29**, 493 (1989).

4. A. Ng, P. Celliers, G. Hu, and A. Forsman, Phys. Rev. E **52**, 4299 (1995).

5. В. К. Грязнов, В. Е. Фортов, М. В. Жерноклетов, Г. В. Симаков, Р. Ф. Трунин, Л. И. Трусов, И. Л. Иосилевский, ЖЭТФ **114**, 1242 (1998).

6. D. Riley, N. C. Woolsey, D. McSherry, I. Weaver, A. Djaoui, and E. Nardi, Phys. Rev. Lett. **84**, 1704 (2000).

7. A. W. DeSilva and J. D. Katsouros, J. de Phys. IV **10** (5), 209 (2000).

8. V. N. Korobenko, A. D. Rakhel, A. I. Savvatimskiy, and V. E. Fortov, Plasma Phys. Rep. **28**, 1008 (2002).

9. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Физматлит, Москва (2001).

10. Л. А. Арцимович, Р. З. Сагдеев, *Физика плазмы для физиков*, Атомиздат, Москва (1979).

11. А. А. Валуев, ТВТ **18**, 422 (1980).

12. Yu. K. Kurilenkov and A. A. Valuev, Beitr. Plasma Physik **24**, 161 (1984).

13. M. A. Berkovsky and Yu. K. Kurilenkov, J. Phys. B **24**, 5043 (1991).

14. А. А. Валуев, А. С. Каклюгин, Г. Э. Норман, ЖЭТФ **114**, 880 (1998).

15. А. А. Валуев, ТВТ **15**, 1143 (1977).

16. J. P. Hansen and I. R. McDonald, Phys. Rev. A **23**, 2041 (1981).

17. А. А. Валуев, И. В. Морозов, Г. Э. Норман, ДАН **362**, 752 (1998).

18. A. Selchow, G. Röpke, A. Wierling, H. Reinholz, T. Pschiwul, and G. Zwicknagel, Phys. Rev. E **64**, 056410 (2001).

19. V. Golubnychiy, M. Bonitz, D. Kremp, and M. Schlanges, Phys. Rev. A **64**, 016409 (2001).

20. G. E. Norman and A. A. Valuev, in *Strongly Coupled Coulomb Systems*, ed. by G. Kalman, M. Rommel, and K. Blagoev, Plenum Press, New York (1998), p. 103.

21. A. S. Kaklyugin, G. E. Norman, and A. A. Valuev, J. Tech. Phys. **41**, 65 (2000).

22. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Колебания и волны в плазменных средах*, изд-во МГУ, Москва (1990).

23. Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Физматлит, Москва (2002), т. 1.

24. А. С. Кингсеп, *Введение в нелинейную физику плазмы*, МФТИ, Москва (1996).

25. Р. Р. Рамазашвили, А. А. Рухадзе, В. П. Силин, ЖЭТФ **43**, 1323 (1962).

26. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман, ТВТ **7**, 822 (1969).

27. Г. Э. Норман, Письма в ЖЭТФ **73**, 13 (2001).

28. C. Aman, J. B. C. Pettersson, L. Lindroth, and L. Holmlid, J. Mater. Res. **7**, 100 (1992).

29. L. Holmlid, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 357 (2004).

30. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin, R. Dumke, S. D. Bergeson, and S. L. Rolston, Phys. Rev. Lett. **86**, 3759 (2001).

31. F. J. Dyson, J. Math. Phys. **8**, 1538 (1967).

32. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ **6**, 410 (1968).

33. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1981).

34. A. V. Filinov, M. Bonitz, and W. Ebeling, J. Phys. A **36**, 5957 (2003).

35. C. Deutsch, Phys. Lett. **60A**, 317 (1977).

36. C. Deutsch, M. M. Gombert, and H. Minoo, Phys. Lett. **66A**, 381 (1978); **72A**, 481 (1979).

37. I. V. Morozov and G. E. Norman, J. Phys. A **36**, 6005 (2003).

38. I. V. Morozov, G. E. Norman, and A. A. Valuev, Phys. Rev. E **63**, 36405 (2001).

39. С. И. Андреев, Н. Ф. Ивасенко, *Основы расчета импульсных ксеноновых ламп*, изд-во Томского унив., Томск (1982).

40. H. Reinholz, I. Morozov, G. Röpke, and Th. Millat, Phys. Rev. E **69**, 066412 (2004).

41. Д. Бом, *Общая теория коллективных переменных*, Мир, Москва (1964).

42. G. E. Norman and A. A. Valuev, Plasma Phys. **21**, 531 (1979).

43. А. А. Валуев, Ю. К. Куриленков, ТВТ **21**, 591 (1983).

44. Yu. K. Kurilenkov and A. A. Valuev, Beitr. Plasma Physik **24**, 529 (1984).

45. H. Reinholz, R. Redmer, G. Röpke, and A. Wierling, Phys. Rev. E **62**, 5648 (2000).

46. A. Esser, R. Redmer, and G. Röpke, Contrib. Plasma Phys. **43**, 33 (2003).

47. И. Я. Дихтер, В. А. Зейгарник, ДАН СССР **227**, 656 (1976).

48. Е. М. Апфельбаум, М. Ф. Иванов, Физика плазмы **27**, 79 (2001).

49. M. A. Berkovsky, D. Djordjevic, Yu. K. Kurilenkov, and H. M. Milchberg, J. Phys. B **24**, 5043 (1991).

50. M. Schlanges, Th. Bornath, D. Kremp, and P. Hilse, Contrib. Plasma Phys. **43**, 360 (2003).

51. I. V. Morozov, G. E. Norman, A. A. Valuev, and I. A. Valuev, J. Phys. A **36**, 8723 (2003).

52. Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, ЖЭТФ **119**, 1011 (2001).