01;02

Тройная рекомбинация электронов и ионов в присутствии двухуровневых атомов

© А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Институт общей физики РАН,
117942 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 20 августа 1996 г.)

В рамках диффузионной модели рассмотрена функция распределения связанных электронов и скорость рекомбинации электронов и ионов в присутствии двухуровневых атомов. Рассмотрены два случая: а) в соответствии с традиционными представлениями полагается, что релаксация происходит за счет парных столкновений; б) предполагается наличие аномального дрейфа, обнаруженного ранее на основе моделирования из первопринципов. Показано, что распределение связанных электронов, полученное на основе представлений о парных кулоновских столкновениях, не согласуется с результатами численного моделирования динамики многих частиц, в то время как кинетическая модель, использующая представление об аномальном дрейфе, согласуется с результатами моделирования.

Введение

Моделирование динамики многих кулоновских частиц (ДМЧ) приводит к плодотворным результатам, если его сопровождать анализом соответствующих кинетических моделей [1–5]. В работах [6,7] результаты ДМЧ моделирования релаксации системы кулоновских частиц в термостате двухуровневых атомов сопоставлялись с кинетическими моделями, противоречащими принципу детального равновесия, и было получено хорошее согласие. В связи с разными точками зрения, высказывавшимися в работах [8–12], относительно интерпретации результатов ДМЧ моделирования [1–3], представляется целесообразным еще раз проверить, насколько результаты моделирования противоречат традиционным моделям рекомбинации, опирающимся на представления о парных кулоновских столкновениях и принцип детального равновесия.

В связи с этим ниже рассмотрен вид функции распределения, следующей из диффузионной модели с кинетическими коэффициентами, полученными на основе традиционных представлений о парных кулоновских столкновениях и подчиняющимися соотношениям, следующим из принципа детального равновесия. Эта функция сравнивается с результатами ДМЧ моделирования и функцией, получаемой при кинетических коэффициентах, не соответствующих принципу детального равновесия.

Постановка задачи в модели парных столкновений

Уравнение Фоккера–Планка. Для функции распределения электронов $f(\varepsilon)$ по полной энергии электрона ε будем использовать уравнение Фоккера–Планка

$$\partial f/\partial t = -\partial\Gamma/\partial\varepsilon,$$

$$\Gamma = Af - \partial(Bf)/\partial\varepsilon \equiv \tilde{A}f - B\partial f/\partial\varepsilon.$$

Здесь Γ — поток электронов по энергетической оси (при рекомбинации $\Gamma < 0$); A, B — кинетические коэффициенты соответственно подвижности и диффузии по энергетической оси; $\tilde{A} \equiv A - \partial B/\partial\varepsilon$ — модифицированный коэффициент подвижности. Использование диффузионного приближения предполагает, что движение электронов по энергетической оси совершается малыми порциями, на этих энергетических интервалах кинетические коэффициенты меняются слабо.

Ниже, как обычно, используется квазистационарное приближение $\partial f/\partial t = 0$, $\Gamma = \text{const}$, откуда следует

$$\Gamma = \tilde{A}(\varepsilon)f(\varepsilon) - B(\varepsilon)df(\varepsilon)d\varepsilon = \text{const}. \qquad (1)$$

Граничные условия для этого уравнения зависят от того, какой процесс (рекомбинация или ионизация) описывается; они будут поставлены ниже. Пока отметим только, что при определении релаксационного потока (т.е. числа электронов, рекомбинирующих или отрывающихся от ионов в единицу времени) на основе квазистационарного уравнения Фоккера–Планка (1) нет необходимости уточнять границу между связанными и свободными электронами. Это важно в связи с тем, что, как правило, нельзя однозначно отнести высоковозбужденные электроны к связанным или свободным; положение границы между ними можно указать только оценочно.

Принцип детального равновесия. В термодинамическом равновесии функция распределения электронов плазмы по полной энергии является больцмановской

$$f_{\text{Б}}(y) = g(y)\exp(-y),$$

$$g(y) = \frac{C}{T_t}\begin{cases} \frac{2}{\pi^{1/2}}y^{1/2} & \text{при } \ y \gg \delta^{1/3}, \\ \frac{\pi^{3/2}}{4}\delta|y|^{-5/2} & \text{при } \ |y| \gg \delta^{1/3}, \quad y < 0, \end{cases}$$

где $y = \varepsilon/T_e$ — приведенная энергия, $\delta = 2e^6N_i/T_e^3$ — параметр неидеальности плазмы.

Согласно принципу детального равновесия, подстановка больцмановского распределения в уравнение диффузии должна тождественно обращать в нуль выражение для потока. Это накладывает следующую связь на выражения для коэффициентов диффузии и подвижности

$$\tilde{A}(\varepsilon) f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_e) - B(\varepsilon) d f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_e)/d\varepsilon = 0. \qquad (2)$$

Как известно, для парных столкновений принцип детального равновесия следует из обратимости во времени акта столкновения частиц. В общем случае принцип детального равновесия является следствием предположения об эргодичности рассматриваемой системы.

Кинетические коэффициенты. Используемое ниже выражение для коэффициента диффузии связанного электрона под воздействием кулоновских столкновений с электронами плазмы получено в работах [13,14]. Его можно представить в виде

$$B_c = \frac{8\sqrt{\pi}}{3} e^4 N_e \Lambda \sqrt{\frac{2T_e}{m_e}} x^{1/2} \mu(x),$$

$$\mu(x) = \frac{x^{1/2}}{\sqrt{1 + 6x + 0.75x^2 + \pi x^3/16}}.$$

Здесь $x = -y$ — нормированная на температуру электронов энергия связи электрона, $\Lambda = \sqrt{1 + 9/4\pi\delta}$ — кулоновский логарифм. Выражение для коэффициента диффузии связанного электрона под воздействием неупругих столкновений с двухуровневыми атомами получено в работах [5,6] (см. также [2])

$$B_a = \frac{4}{3\pi} \Delta\varepsilon^2 \sigma_0 N_a \sqrt{\frac{2T_e}{m_e}} \sqrt{x}.$$

Здесь $\Delta\varepsilon > 0$ — разность энергии атомных уровней, N_a — плотность атомов, σ_0 — сечение возбуждения атома электронным ударом вблизи порога. Для простоты в рамках модели [5,6] считается, что при превышении порога сечение не меняется. Отметим, что это приводит к некоторому завышению скорости релаксации для сильно связанных электронов. Считается, кроме того, что заселенности основного и возбужденного состояний распределены по Больцману с температурой атомов T_a; это моделирует воздействие термостата двухуровневых атомов.

Для оправданности диффузионного приближения необходимо выполнение условий малости энергии перехода по сравнению с характерным масштабом изменения функции распределения. В частности, должно быть $\Delta\varepsilon \ll T_e,\ T_a$.

Уравнение стационарного стока и граничные условия. Будем считать, что диффузия электрона по энергетической оси за счет столкновений с атомами и с электронами происходит независимо. Тогда кинетические коэффициенты в уравнении (1) являются суммами соответствующих величин, а уравнение для функции распределения приобретает вид

$$\Gamma = (\tilde{A}_a + A_c) f(\varepsilon) - (B_a + B_c) d f(\varepsilon) d\varepsilon = \text{const}.$$

Вводя функцию, характеризующую отклонение рекомбинационного распределения от больцмановского

$$\Phi(\varepsilon/T_e) = f(\varepsilon)/f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_e),$$

и используя принцип детального равновесия для $e{-}e$- и $e{-}a$-столкновений

$$\tilde{A}_c(\varepsilon) f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_e) - B_c(\varepsilon) d f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_e)/d\varepsilon = 0,$$

$$\tilde{A}_a(\varepsilon) f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_a) - B_a(\varepsilon) d f_{\text{Б}}(\varepsilon/T_a)/d\varepsilon = 0,$$

имеем

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} + \Phi(x)\frac{1-\theta}{1 + B_c/B_a} + \frac{-\Gamma T_e}{f_{\text{Б}}(x) B_a (1 + B_c/B_a)} = 0,$$

где $x = -\varepsilon/T_e$, $\theta = T_e/T_a$.

Граничные условия поставим в виде $\lim_{x\to\infty} \Phi(x) = 0$, $\lim_{x\to 0} \Phi(x) = 1$. Они отражают тот факт, что при малой энергии связи электрона распределение должно переходить в больцмановское, а при большой энергии связи должно быть много меньшим больцмановского. Этим граничным условиям соответствует квазистационарный сток электронов из континуума в сильносвязанные состояния. Время установления функции распределения, соответствующей стационарному стоку, порядка времени между кулоновскими столкновениями (подробнее см. [1–3, 14]).

Распределение электронов по энергетической оси и скорость рекомбинации в модели парных столкновений

Исходное уравнение. Используя конкретные выражения для коэффициентов диффузии, уравнение (1) можно преобразовать к виду

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} + \Phi(x)\frac{1-\theta}{1 + \mu(x)/c_1} + \frac{\text{const} x^2 e^x}{1 + \mu(x)/c_1} = 0,$$

где параметр

$$c_1 = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \frac{\Delta\varepsilon^2 \sigma_0}{e^4 \Lambda} \frac{N_a}{N_e}$$

характеризует соотношение интенсивностей кулоновских столкновений и неупругих столкновений электронов с атомами. Поскольку это уравнение линейно, то просто написать его решение в квадратурах. Однако соответствующие интегральные выражения неудобны для получения конкретных результатов. Проще проанализировать предельные случаи, а в промежуточной области проводить численное интегрирование непосредственно дифференциального уравнения.

Предельные случаи. При $c_1 \to 0$, пренебрегая неупругими столкновениями с атомами, имеем

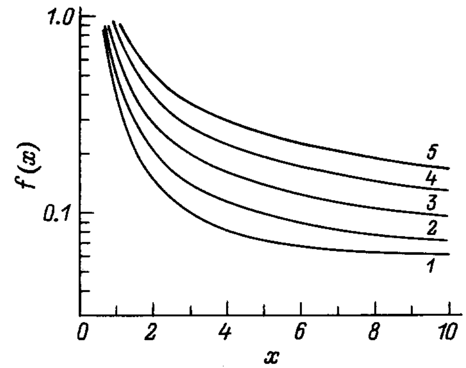

Рис. 1. Функции распределения частиц по полной энергии для модели с выполнением принципа детального равновесия. *1, 5* — предельные случаи отсутствия и преобладания неупругих столкновений; *2–4* — расчет при $c_1 = 0.1$, 0.3, 1 соответственно.

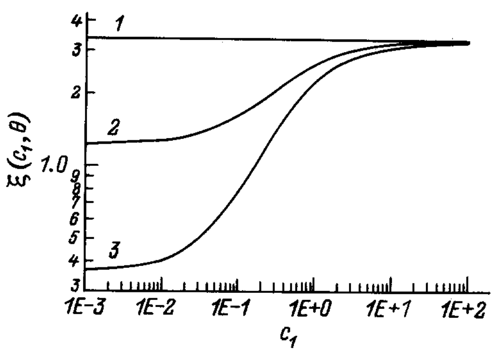

Рис. 2. Зависимость доли рекомбинационного потока за счет неупругих столкновений от коэффициента, характеризующего эффективность неупругих столкновений. $\theta = 1$ (*1*), 2.5 (*2*), 5 (*3*).

известные выражения для функции распределения и рекомбинационного потока [13,14]

$$f_c(x) = f_Б(x)$$
$$\times \left[\int\limits_x^\infty dzz^2 \exp(-z)/\mu(z)\right] \Big/ \left[\int\limits_0^\infty dzz^2 \exp(-z)/\mu(z)\right],$$

$$|\Gamma_c| = \frac{4}{5.004}\,\frac{2^{5/2}\pi^{3/2}}{9}\,\frac{e^{10}\Lambda}{\sqrt{m_e}}\,\frac{N_e^2}{T_e^{9/2}}.$$

С точностью не хуже 5% функция распределения аппроксимируется выражением

$$f_c(x) = \frac{\pi^{3/2}}{4}\,\delta\,\frac{1 + x + 0.476x^2 + 0.0657x^3}{x^{5/2}},$$

дающим правильные асимптотики. При $c_1 \to \infty$, пренебрегая кулоновскими столкновениями, можно получить (ср. [6,7])

$$f_a(x,\theta) = \frac{\pi^{3/2}}{4}\,\delta\,\frac{2 + 2\theta x + \theta^2 x^2}{2x^{5/2}},$$

$$|\Gamma_a| = \frac{2^{1/2}\pi^{1/2}}{3}\,\frac{e^6\sigma_0\Delta\varepsilon^2 N_e N_a}{\sqrt{m_e}T_a^3 T_e^{3/2}}.$$

Р е з у л ь т а т ы р а с ч е т о в. Как показывают результаты расчетов (рис. 1), в случаях, когда ни кулоновскими, ни неупругими столкновениями пренебречь нельзя, функция распределения лежит между приведенными выше предельными выражениями. Результирующий рекомбинационный поток можно представить в виде

$$\Gamma = \Gamma_c\left[1 + c_1\theta^3\xi(c_1,\theta)\right], \tag{3}$$

где функция $\xi(c_1,\theta)$ описывает переходную область для скорости рекомбинации (рис. 2).

Распределение электронов по энергетической оси и скорость рекомбинации в модели аномального дрейфа

М и к р о п о л е в о е р а с п р е д е л е н и е. В работе [1] (см. также [2,3]) на основе результатов численного моделирования было предположено, что возможно квазистационарное распределение электронов (при $\Gamma = 0$), не совпадающее с равновесным, больцмановским распределением. Оно формируется за счет того, что коэффициенты подвижности и диффузии электрона по энергетической оси не подчиняются соотношению (2), вытекающему из принципа детального равновесия. При этом имеет место аномальный дрейф электронов по энергетической оси: аномально направленный (из области электронов с отрицательной энергией в область положительных энергий) и аномально сильный (превышающий кулоновский). Исходя из оценочных соображений, было получено выражение для "микрополевой" функции распределения

$$f_f(y) = \frac{2C}{\sqrt{\pi}}\begin{cases}\sqrt{y}\exp(-y), & y > \alpha\delta^{1/3},\\ C_3\exp(C_1 y + C_2 y^2/2), & |y| \leqslant \alpha\delta^{1/3},\\ C_4\exp(\beta y/\delta^{1/3}), & y < -\alpha\delta^{1/3},\end{cases} \tag{4}$$

учитывающей аномальный дрейф по энергетической оси. Здесь

$$C_1 = \left[-1 + 1/(2\alpha\delta^{1/3}) + \beta/\delta^{1/3}\right]/2,$$
$$C_2 = \left[-1 + 1/(2\alpha\delta^{1/3}) - \beta/\delta^{1/3}\right]/(2\alpha\delta^{1/3}),$$
$$C_3 = \alpha^{1/2}\delta^{1/6}\exp[-\alpha\beta^{1/3}(1 + C_1 + C_2\alpha\delta^{1/3}/2)],$$
$$C_4 = \alpha^{1/2}\delta^{1/6}\exp\left[\alpha\beta - \alpha\beta^{1/3}(1 + 2C_1)\right],$$
$$C^{-1} = 1 - (2/\sqrt{\pi})\gamma(3/2, \alpha\delta^{1/3}) + (2C_3/\sqrt{\pi})$$
$$\times \int\limits_{-\alpha\delta^{1/3}}^{\alpha\delta^{1/3}} \exp\left(C_1 y + C_2 y^2/2\right)dy$$
$$+ (2C_4\delta^{1/3}/\beta\sqrt{\pi})\exp(-\alpha\beta),$$

где $\alpha = 1.5$, $\beta = 0.4$ — коэффициенты, численные значения которых выбраны так, чтобы микрополевая функция распределения наилучшим образом описывала результаты численных расчетов.

Исходное уравнение. Исходя из выражений для кинетических коэффициентов, полученных в [6,7] (см. также [3]), уравнение для диффузии электрона по энергетической оси под воздействием плазменных микрополей и неупругих столкновений с двухуровневыми атомами можно записать в следующем виде:

$$\frac{df(x)}{dx} + f(x)\frac{a(x)}{b(x)} + \frac{\text{const}}{b(x)} = 0,$$

где

$$a(x) = \frac{\beta}{\delta^{1/3}} + c_1'\left(\frac{5}{2\sqrt{x}} - \sqrt{x}\theta\right), \quad b(x) = 1 + c_1'\sqrt{x}$$

— обезразмеренные коэффициенты подвижности и диффузии;

$$c_1' = \frac{4}{0.75 \cdot 3\pi}\,\frac{\Delta\varepsilon^2\sigma_0}{e^4}\,\frac{N_a}{N_e}$$

— параметр, характеризующий эффективность неупругих столкновений; при $c_1' \to 0$ решение должно переходить в микрополевое распределение.

Граничные условия определяются из условия малости искомой функции распределения по сравнению с больцмановским распределением при большой энергии связи, а также сшивкой с микрополевым распределением при малых энергиях связи

$$\lim_{x\to\infty} f(x)/f_B(x) = 0, \quad \lim_{x\to\alpha\delta^{1/3}} f(x) = f_f(\alpha\delta^{1/3}).$$

Результаты расчетов. Аналитические выражения для случаев преобладания кулоновского взаимодействия и неупругих столкновений приведены [3,6,7].

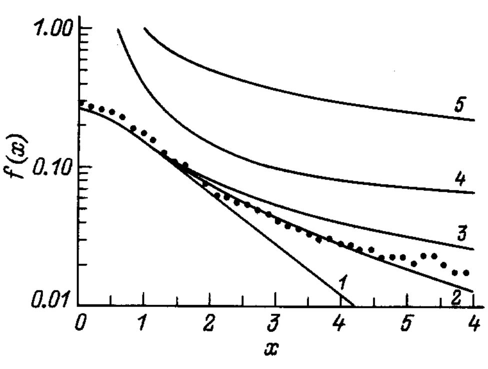

Рис. 3. Функции распределения частиц по полной энергии для модели с аномальным дрейфом для плазмы с параметрами $\delta = 0.11$, $\theta = 2.5$. *1* — случай отсутствия неупругих столкновений; *2, 3* — расчет при интенсивности столкновений $c_1' = 0.1$ и 0.2; *4, 5* — предельные распределения модели с выполнением принципа детального равновесия. Значки — результаты ДМЧ моделирования [3] (см. также [6]) для плазмы с параметрами $\delta = 0.11$, $\theta = 2.5$, $c_1' \approx 0.1$.

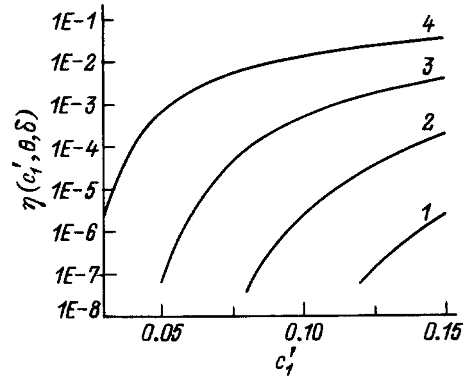

Рис. 4. Зависимость скорости рекомбинации (для модели с аномальным дрейфом) от коэффициента c_1'. $\delta = 0.11$, $\theta = 1$ (*1*), 1.5 (*2*), 2.5 (*3*), 5 (*4*).

Мы здесь рассмотрим лишь некоторые результаты численных расчетов. Как показывают результаты расчетов (рис. 3), у микрополевой функции распределения за счет неупругих столкновений отрастает "хвост" в области отрицательных энергий. Однако вид распределения электронов в хвосте существенно отличается от того, что должно иметь место при выполнении принципа детального равновесия. При наличии аномального дрейфа падение функции распределения с ростом энергии связи, естественно, оказывается существенно более крутым. Рекомбинационный поток в данной модели является функцией 3 параметров и может быть представлен в виде

$$|\Gamma_f| = N_e(2T_e/m_e)^{1/2}(e^2/T_e)^2\eta(c_1', \theta, \delta).$$

С ростом эффективности неупругих столкновений рекомбинационный поток монотонно растет (рис. 4).

Сопоставление с данными ДМЧ моделирования [6,7] показывает, что традиционная модель, опирающаяся на представления о парных кулоновских столкновениях и принцип детального баланса, не может объяснить получаемый в расчетах вид распределения (рис. 3).

Заключение

Результаты данной работы согласуются с концепцией, подытоженной в обзорах [1–3]. Суть этой концепции состоит в следующем. Поступательные и ионизационные степени свободы в системе кулоновских частиц перемешиваются аномально долго по сравнению с той ситуацией, которая имела бы место, если бы релаксация связанных состояний описывалась парными кулоновскими столкновениями. Опираясь на известный закон сохранения энтропии для гамильтоновых систем, естественно сделать вывод о том, что релаксация к статистически равновесному состоянию в динамической системе имеет место лишь при наличии внешнего (по отношению к динамическим уравнениям) стохастического воздействия. Поступательные степени свободы неустойчивы по отношению к внешним воздействиям, и поэтому уже небольшие погрешности численного счета приводят к установлению максвелловского распределения. В то же время установление равновесия между свободными и связанными состояниями для классических кулоновских частиц не соответствует представлениям о парных кулоновских столкновениях[1] и о применимости в данном случае принципа детального равновесия в традиционной формулировке.

Моделирование как изолированной от стохастических воздействий системы классических кулоновских частиц, так и системы, подвергающейся внешнему стохастическому воздействию, показывает, что имеет место аномальный дрейф электронов по энергетической оси. Возможно, он порождается коллективными колебаниями плазмы [5]. Наличие аномального дрейфа приводит к формированию метастабильного состояния классической кулоновской плазмы.

Список литературы

[1] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Изв. вузов, Физика. 1991. Т. 34. № 11. С. 3–34.
[2] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // УФН. 1994. Т. 164. № 3. С. 298–307.
[3] *Mayorov S.A., Tkachev A.N., Yakovlenko S.I.* // Physica Scripta. 1995. Vol. 51. P. 498–516.
[4] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике ФИАН СССР. 1995. № 9–10. С. 28–34.
[5] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике ФИАН СССР. 1995. № 9–10. С. 35–39.
[6] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Математическое моделирование. 1992. № 7. С. 3–30.
[7] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Изв. вузов, Физика. 1993. Т. 36. № 1. С. 68–89.
[8] *Горский А.И., Дзензерский В.А., Кучугурный Ю.П.* // Письма ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 16. С. 25–28.
[9] *Игнатов А.М., Коротченко А.И., Макаров В.П., Рухадзе А.А., Самохин А.А.* // УФН. 1995. Т. 165. № 1. С. 113–117.
[10] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // УФН. 1995. Т. 165. № 1. С. 117–118.
[11] *Рухадзе А.А.* // Кр. сообщения по физике ФИАН СССР. 1995. № 9–10. С. 40.
[12] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике ФИАН СССР. 1996.
[13] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике ФИАН СССР. 1990. № 7. С. 10.
[14] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Изв. вузов, Физика. 1994. Т. 37. № 9. С. 3–19.

[1] Как показано в [5,6] (см. также [2,3]), дискретность связанных состояний способствует преобладанию роли парных столкновений для легких кулоновских частиц.