

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

На правах рукописи

Бутлицкий Михаил Анатольевич

**Термодинамика ультрахолодной
ридберговской плазмы**

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Специальность 01.04.14 — теплофизика и теоретическая теплотехника

Научный руководитель:
канд. физ.–мат. наук, Зеленер Борис Вигдорович

Москва — 2015

Глава 1. Введение	3
1.1 Актуальность и степень разработанности проблемы	3
1.2 Цели работы и научная новизна.....	5
1.3 Научная и практическая значимость работы.....	7
1.4 Положения, выносимые на защиту.....	8
1.5 Степень достоверности результатов и апробация работы	9
1.6 Публикации по теме диссертации	9
1.7 Структура и объем диссертации	10
Глава 2. Обзор литературы.....	13
2.1 Эксперименты в термоэмиссионных диодах.....	13
2.2 Теория ридберговского вещества в плотных системах	19
2.3 Эксперименты с системами ультрахолодных ридберговских атомов	23
2.4 Теоретические работы по ультрахолодной ридберговской плазме.....	28
Глава 3. Модифицированная псевдопотенциальная модель.....	37
3.1 Псевдопотенциальная модель двухкомпонентной плазмы.....	37
3.2 Обоснование расчета термодинамических свойств и особенности модели..	41
3.3 Квазиклассический расчет псевдопотенциалов взаимодействия	47
3.4 «Точный» расчет электрон–протонного псевдопотенциала	53
3.5 Выводы	63
Глава 4. Термодинамические свойства ридберговской плазмы	64
4.1 Метод расчета термодинамических и корреляционных свойств	64
4.2 Результаты расчетов.....	66
4.3 Выводы	75
Глава 5. Базовая модель двухкомпонентной плазмы «кулон с полочкой» .	77
5.1 Актуальность и характерные особенности модели «кулон с полочкой».....	78
5.2 Расчет термодинамических свойств модели методом Монте–Карло	84
5.3 Результаты расчетов: уравнение состояния и фазовый переход	88
5.4 Выводы	96
Заключение	97
Список литературы	103

Глава 1. Введение

1.1 Актуальность и степень разработанности проблемы

Понятие ридберговского вещества как системы возбужденных атомов с образованием конденсированных возбужденных состояний было впервые предложено в 80–е годы в работах Эдуарда Манькина с соавторами [1, 2], где рассматривался газ электронов и ионов такой плотности, когда электроны вырождены, а температура очень близка к нулю. Конденсированные возбужденные состояния в этих работах применялись для описания плотных систем возбужденных центров — атомов, молекул, примесей в твердых телах [1, 3]. Примером конденсированных возбужденных состояний может служить хорошо известное электронно–дырочное состояние, возникающее вследствие конденсации экситонов — элементарных возбуждений полупроводников [1].

Под ридберговским веществом или ридберговской плазмой в данной работе понимается система, состоящая из высоко возбужденных водородоподобных атомов, ионов и свободных электронов. В отличие от работ [1, 2], в данной работе рассматриваются такие состояния газа высоковозбужденных атомов, где средние расстояния между частицами много больше дебройлевской длины волны (отсутствует вырождение), а температура меняется в диапазоне от 1 до 1000 К.

В последнее время проявляется большой интерес к изучению таких систем (см. гл. 2 обзор литературы). Экспериментальные исследования ридберговского вещества пока достаточно немногочисленны. Тем не менее, существует предположение, что конденсированное состояние ридберговского вещества возможно как при условиях больших температур и больших плотностей (как например в экспериментах шведских исследователей 90–х годов [4–7]), так и при ультранизких температурах в разреженных системах (в более поздних экспериментах американских исследователей [8–10]). Ридберговское вещество,

полученное в этих экспериментах, существенно отличается от рассмотренного в [1, 2] тем, что электроны и ионы не являются вырожденными.

Во всех этих экспериментах были обнаружены необычные свойства систем высоковозбужденных атомов, такие как аномально низкое омическое сопротивление облака частиц и замедление рекомбинации. До сих пор не существует непротиворечивой теоретической модели описания и объяснения всех свойств таких систем. Это по-видимому связано с тем, что существующие экспериментальные данные достаточно отрывочны и неполны ввиду сложности получения и диагностики таких систем. Что дает возможность по-разному интерпретировать результаты экспериментов (см. обзор литературы в гл. 2). Также относительно новым и слабо изученным направлением физики можно считать физику плазмы как таковую в области сверхнизких температур (около абсолютного нуля) и высоких значений параметра неидеальности.

В настоящей работе исследуются классические и квантовые невырожденные (длины волны де-Бройля $\lambda = h/mv$ меньше среднего межчастичного расстояния) сильно неидеальные (средняя потенциальная энергия взаимодействия частиц больше средней кинетической энергии) ридберговские системы многих частиц. Т. е. системы, состоящие из атомов, находящихся в высоковозбужденных ридберговских (водородоподобных) состояниях, свободных электронов и ионов. Рассчитываются различные термодинамические свойства этих систем в широком диапазоне температур и плотностей, в том числе соответствующих экспериментальным в [4–11]. В ходе данных исследований были развиты и исследованы псевдопотенциальная модель неидеальной плазмы и модель двухкомпонентной плазмы «кулон с палочкой».

Современное состояние компьютерных технологий позволило выбрать в качестве основного метода исследований классический метод Монте-Карло [12]. Этот метод позволил проводить расчеты термодинамических свойств из первых принципов на основании общих соотношений статистической физики и

термодинамики. Использование численных методов для расчета свойств неидеальных систем обусловлено прежде всего тем, что обычные аналитические подходы (различные методы теории возмущения), использующие в качестве основного приближения модель идеального газа, непригодны из-за отсутствия малого параметра по взаимодействию, а возможность экстраполяции существующих разложений в сильнонеидеальную область вызывает сомнение.

1.2 Цели работы и научная новизна

Целью настоящей работы является решение двух связанных друг с другом задач:

1. Расчет термодинамических свойств и корреляционных функций двухкомпонентной ультрахолодной неидеальной ридберговской плазмы в широкой области параметров.
2. Поиск и детальное изучение области фазового перехода газ–жидкость, определение бинадали, спинодали и критической точки.

Для решения обозначенных проблем в работе *впервые* разработана модифицированная псевдопотенциальная модель, служащая для расчёта термодинамических свойств ридберговской плазмы, находящейся в полном (как в экспериментах [4–7]) и неполном термодинамическом равновесии [8–10]. Для условий экспериментов [8–10] проведён подробный анализ такой системы на основе имеющихся экспериментальных данных, соответствующих параметру неидеальности $\gamma \sim 1$. В области параметров [8–10] проанализирована и обоснована возможность расчета термодинамических свойств системы методами равновесной термодинамики.

Разработанная модель основана на псевдопотенциальной модели невырожденной квантовой системы [13]. Она в общем случае описывает совокупность свободных частиц и их парных, тройных и т. д. связанных

состояний, находящихся в условии химического равновесия. Условно говоря, свободные частицы взаимодействуют при помощи парных псевдопотенциалов. Парные псевдопотенциалы совпадают с классическим взаимодействием на больших и отличаются от него на коротких расстояниях.

Важно, что такой парный псевдопотенциал *не является* реальным потенциалом взаимодействия между частицами. Это лишь удобный и наглядный способ представления конфигурационного интеграла в системе, состоящей из электронов, ионов и высоковозбужденных атомов. Такой способ позволяет удобно учитывать взаимодействие в системе и рассчитывать термодинамику фактически квантовой системы классическим методом Монте–Карло. Стоит отметить также, что выбор псевдопотенциала в такой модели не является однозначным. Он зависит от возможности образования различных связанных состояний в данной системе взаимодействующих частиц, от заданной области параметров, в которой проводится исследование термодинамических свойств.

Для получения парных псевдопотенциалов в работе проведен точный численный расчет из первых принципов матрицы плотности электрон–ионного взаимодействия по водородным волновым функциям *впервые* в области низких температур. Показано хорошее согласие псевдопотенциалов, полученных в рамках квазиклассического приближения [13], с точным численным расчетом по волновым функциям электрон–ионного взаимодействия водородоподобных атомов при низких температурах.

С помощью разработанной псевдопотенциальной модели и полученных псевдопотенциалов в работе *впервые* рассчитаны методом Монте–Карло термодинамические и корреляционные свойства ридберговской плазмы в широкой области параметров.

Для поиска и изучения области фазового перехода типа газ–жидкость в работе развита и проанализирована модель двухкомпонентной плазмы «кулон с полочкой», *впервые* в широкой области параметров.

В модели «кулон с полочкой» *впервые* обнаружен фазовый переход типа газ–жидкость, найдены критическая точка, бинадаль, спинадаль и парные корреляционные функции. Сделана предварительная оценка применимости результатов для модели «кулон с полочкой» к ридберговской плазме.

1.3 Научная и практическая значимость работы

Результаты, полученные в диссертационной работе представляют *во–первых* фундаментальный научный интерес, так как представляют собой непротиворечивую термодинамическую модель ридберговской плазмы в широкой области параметров и позволяют теоретически обосновать некоторые из полученных в экспериментах по ридберговскому веществу данных, а также предсказать наличие других, еще не обнаруженных экспериментально свойств ридберговской плазмы. Например — показана возможность образования метастабильной квази–кристаллической структуры.

Во–вторых, предложенные и разработанные в диссертации физические модели открывают новые свойства модельных систем многих частиц и помогают лучше понять термодинамику и природу фазовых переходов в других моделях двухкомпонентной плазмы (в том числе в области низких температур и высокой неидеальности).

И *наконец*, разработанные в данной диссертации алгоритмы расчетов термодинамических свойств и псевдопотенциалов доступны в открытом виде (<https://github.com/aristofun/montecarlo-plasma>) и могут представлять практический интерес как инструменты численного счета и моделирования равновесной термодинамики плазмы методом Монте–Карло [12], построенные из первых принципов.

1.4 Положения, выносимые на защиту

1. Модифицированная псевдопотенциальная модель неидеальной ридберговской плазмы, состоящей из свободных электронов, ионов и водородоподобных атомов, у которых реализуется только часть возможных высоковозбужденных связанных состояний.
2. Термодинамические и структурные свойства (значения внутренней энергии, парные корреляционные функции) модифицированной псевдопотенциальной модели, полученные численно в широкой области параметров, в том числе, соответствующих экспериментальным [4–7] и [8–11] (температура 0.1–1000 К, плотность частиц 10^2 – 10^{16} см⁻³, уровни возбуждения ридберговских атомов от 36 и выше, от 10 и выше плюс состояния непрерывного спектра).
3. Численный расчет псевдопотенциалов электрон–ионного взаимодействия в области низких температур (< 100 К) по водородным волновым функциям.
4. Расчет и результаты расчета термодинамических и структурных свойств модели двух–компонентной плазмы «кулон с полочкой» в широкой области параметров: уравнения состояния, парные корреляционные функции, внутренние энергии и давление.
5. Фазовый переход типа «газ–жидкость», обнаруженный в модели «кулон с полочкой», и его свойства: кривые границы метастабильных состояний, фазового равновесия, параметры критической точки:

$$P_{crit}^* \approx 0.39, \quad v_{crit}^* \approx 0.17 (\gamma_{crit} \approx 1.8), \quad T_{crit}^* \approx \frac{1}{13} \approx 0.076$$

1.5 Степень достоверности результатов и апробация работы

Достоверность научных результатов обоснована применением современных методов статистической физики, согласием полученных результатов с известными расчетными и аналитическими данными других авторов в тех областях, где существуют такие данные.

Так например, парные корреляционные функции модифицированной псевдопотенциальной модели совпадают в области слабой неидеальности с парными корреляционными функциями идеальной плазмы в приближении Дебая–Хюккеля [14]. А результаты численного расчета матрицы плотности электрон–ионного взаимодействия совпали с результатами аналогичного расчета [14] в пограничной области температур (≥ 100 К).

Результаты работы доложены и обсуждены на следующих конференциях и семинарах: «Научная сессии МИФИ» (Москва, 2008), 22–я и 30–я международные конференции «Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом» (Эльбрус, 2007 и 2015), 13th International Laser Physics Workshop (Trieste, 2004), 21–й и 29–й международные конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 2006 и 2014), научная сессия РАН «Исследования неидеальной плазмы (NPP)» (Москва, 2013), семинар теор. отдела им. Л. М. Бибермана ОИВТ РАН.

1.6 Публикации по теме диссертации

Всего по результатам диссертационного исследования опубликовано 13 печатных работ (из них 8 — тезисы и материалы научных конференций), в том числе 5 — в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК:

1. M. A. Butlitsky, V. E. Fortov, E. A. Manykin, B. B. Zelener, B. V. Zelener, “Thermodynamics of nonideal rydberg plasma created with a dye Laser”, *Laser Physics*, vol. 15 (2), 2005, pp. 256-261
2. М. А. Бутлицкий, Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин «Двухчастичная матрица плотности и псевдопотенциал электрон–протонного взаимодействия при ультранизких температурах», *Жур. выч. мат. и мат. физики*, т. 48, №1, с. 154-158 (2008)
3. Бутлицкий М. А., Зеленер Б. Б., Зеленер Б. В., Манькин Э. А., Хихлуха Д. Р. «Функция распределения и кинетические процессы в ультрахолодном ридберговском веществе», *Ядерная физики и инжиниринг*, 2012, т. 3 №2, с. 151
4. M. A. Butlitsky, B. B. Zelener and B. V. Zelener “Critical point of gas-liquid type phase transition and phase equilibrium functions in developed two-component plasma model”, *J. Chem. Phys.* 141, 024511 (2014)
5. М. А. Бутлицкий, Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер «К вопросу о кулоновском фазовом переходе», *TBT*, 2015, том 53, №2, с. 163–168

1.7 Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из пяти глав, заключения и списка литературы. В *первой главе* (введение) показана актуальность теоретического исследования ридберговской плазмы, формулируются задачи и цели диссертации, кратко перечисляются выбранные методы решения задач, указаны новизна и научная значимость работы, изложены основные положения, выносимые на защиту.

Вторая глава содержит обзор литературы. Кратко приводятся основные теоретические и экспериментальные работы, касающиеся ридберговской плазмы. А именно: эксперименты проведённые в области низких и ультранизких температур [8–11], где обнаружено аномальное замедление рекомбинации и эксперименты в термоэмиссионных диодах [4–7], в которых обнаружено

формирование кластеров из тысяч высоковозбужденных атомов. Рассмотрены также существующие теоретические подходы, предлагавшиеся для изучения ридберговского вещества, в т. ч. для объяснения необычных свойств, полученных в экспериментах. Теория конденсированного ридберговского вещества [1, 2] к современным экспериментам [4–11] оказывается практически не применима, поскольку не учитывает температурные эффекты и рассматривает вырожденные электроны. Показано, что более поздние теоретические работы в попытках объяснить результаты экспериментов предлагают прежде всего кинетические модели экспериментов, отчасти противоречащие друг другу. Не используя при этом возможность рассмотреть систему в неполном термодинамическом равновесии.

В *третьей главе* сформулирована физическая модель, предложенная для решения задачи расчета термодинамических и корреляционных свойств неидеальной ридберговской плазмы. Обоснована правомерность расчёта термодинамики неравновесной системы, находящейся в неполном термодинамическом равновесии, обусловленная прежде всего замедлением рекомбинации. Заданы границы применимости модели и результатов расчетов — они обусловлены прежде всего отсутствием вырождения и применимостью парного приближения при расчете взаимодействия (среднее межчастичное расстояние много меньше дебройлевской длины волны и больше или сравнимо с размером ридберговского атома).

Полученная в этой главе модифицированная псевдопотенциальная модель основана на псевдопотенциальной модели сильнонеидеальной плазмы [13] и используется далее в диссертации для численного расчета свойств ридберговской плазмы. Ключевым отличием модифицированной псевдопотенциальной модели от оригинальной является отсутствие в модифицированной части уровней дискретного спектра ридберговского атома. Показана существенная зависимость свойств модели от уровней, исключенных из дискретного спектра.

Также в этой главе обоснован и произведен точный численный расчет псевдопотенциалов электрон–ионного взаимодействия. Эти псевдопотенциалы используются затем как параметр модифицированной псевдопотенциальной модели при численном счете. Обнаружено, что точность квазиклассического расчета псевдопотенциала [13] тем лучше, чем ниже температура.

В *четвертой главе* численным методом Монте–Карло рассчитаны термодинамические свойства и структура ридберговской плазмы в широкой области параметров. В рамках модели, сформулированной в третьей главе. Описан алгоритм расчёта. Обнаружена область формирования квазикристаллической структуры из зарядов обоих знаков, причем существует область, где удельная внутренняя энергия на частицу отрицательна. На этом основании сделано предположение о возможности существования метастабильных периодических структур в ридберговской плазме.

Получены парные корреляционные функции. На основе анализа корреляционных функций (наличие ближнего и дальнего порядков) построены n – T диаграммы. Эти диаграммы обнаружили области газоподобной, жидкоподобной и кристаллоподобной структуры во всем диапазоне исследованных температур (1–1000 К) для различных псевдопотенциалов (учет уровней дискретного спектра с 10–го и с 36–го). Сделано предположение о наличие фазового перехода типа газ–жидкость в этой модели.

В *пятой главе* исследована более общая модель двухкомпонентной плазмы «кулон с полочкой». Эта модель была предложена впервые в [16] как базовая модель для расчета равновесных свойств двухкомпонентной низкотемпературной плазмы. Однако подробное исследование термодинамики самой модели в широком диапазоне параметров сделано впервые в диссертации. Методом Монте–Карло рассчитаны корреляционные свойства, уравнение состояния.

Обнаружен фазовый переход типа «газ–жидкость» и рассчитаны параметры критической точки, найдены бинадаль и спинодаль.

В *заключении* работы сделан общий анализ всех полученных в работе результатов и перечислены основные выводы. Наглядно показано качественное согласие параметров фазового перехода в модели «кулон с полочкой» с n - T диаграммами модифицированной псевдопотенциальной модели ридберговской плазмы. Сделано предположение о возможности фазового перехода типа «газ–жидкость» в условиях экспериментов по ультрахолодной ридберговской плазме.

Глава 2. Обзор литературы

2.1 Эксперименты в термоэмиссионных диодах

В 90–е годы группами шведских и российских исследователей были проведены эксперименты с использованием термо–эмиссионных диодов (ТЭД). В [4–7] эксперименты проводились в высоковакуумной камере. Источником цезиевых атомов служил стеклянный контейнер с металлическим цезием, температура которого составляла 130–150 °С. Эмиттером возбужденных атомов служила графитовая фольга, подогреваемая до температуры 1300 К. При ударе об эмиттер атомы цезия эффективно возбуждаются, и становится возможным их ионизация электрическими полями всего 200–400 В/см. Поток возбужденных атомов цезия от эмиттера могут быть до 10^{15} см⁻³с⁻¹. Такая высокая эффективность возбуждения цезия объясняется совпадением высоты потенциального барьера десорбции атомов с поверхности графита и энергии цезия в высоковозбужденном состоянии [7]. Схема экспериментальной установки из работы показана на рис. 1.

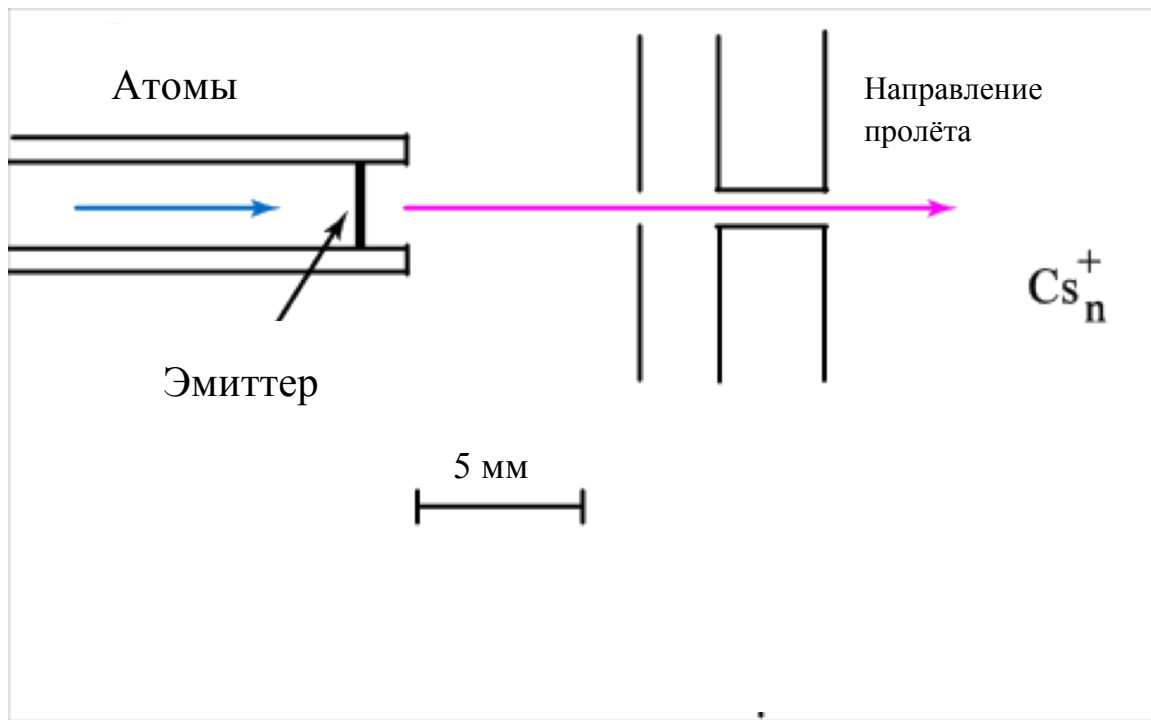


Рис. 1. Схема экспериментальной установки по наблюдению кластеров конденсата.

Поток возбужденных атомов исследовался с помощью масс-спектрометра. Энергия летящих частиц в спектрометре измерялась на середине 75 см пролетного пути. Были зарегистрированы ионы Cs^+ , которые образовывались при ионизации высоковозбужденных атомов цезия. Их время пролета составляло 25 мкс. Низкие значения ионизирующего поля свидетельствовали о том, что цезий возбуждается эмиттером до уровней порядка 30. В спектрах сигналов, помимо пиков, соответствующих атомам цезия, зарегистрированы уширенные пики, соответствующие тяжелым кластерам из атомов цезия, масса которых примерно в сорок тысяч раз больше массы атомов цезия (рис. 2).

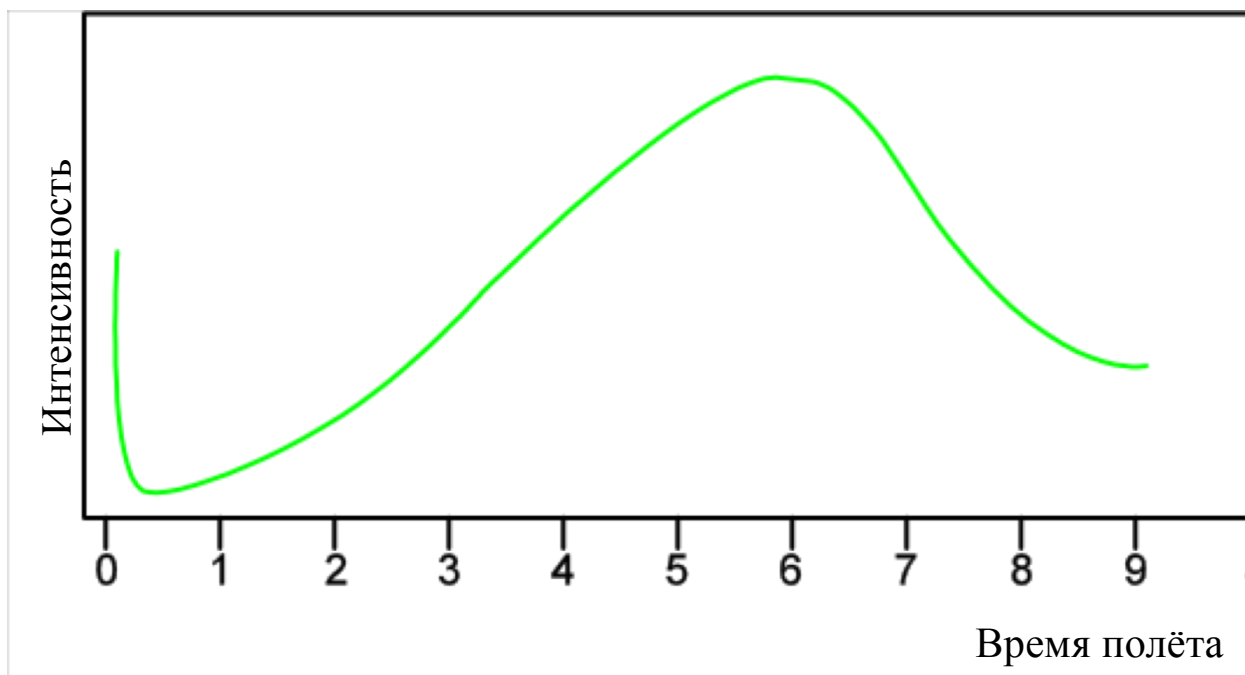


Рис. 2. Типичный сигнал. При времени полета 6 мс масса кластера с энергией 200 эВ соответствовала 4×10^4 ионов цезия.

Время полета для них было 2–6 мкс, а энергия 100–250 эВ. Важно, что кластеры были также легко ионизирующиеся. Авторы предположили, что эти кластеры конденсата состоят из возбужденных атомов цезия.

В работе [5] исследовались вольтамперная характеристика (ВАХ) открытого термоионного конвертора — плоскопараллельного промежутка при условиях, когда в нем образовывался конденсат из возбужденных атомов Cs. Открытый термоионный конвертер состоит из молибденового пленочного электрода (обычно используемого как эмиттер конвертера) и плоской поверхности эмиттера цезия (рис. 3).

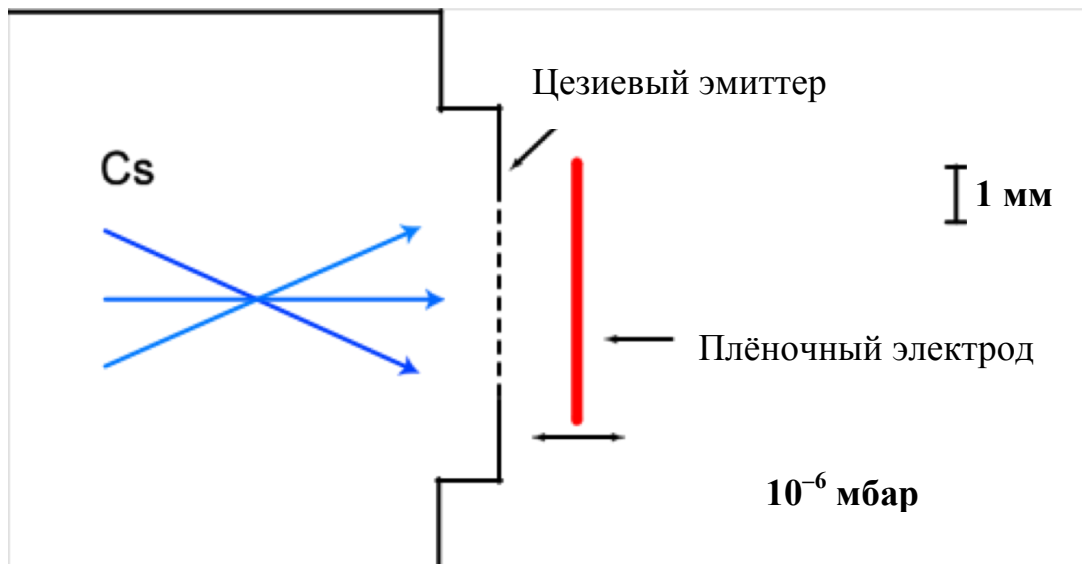


Рис. 3. Схема установки по исследованию ВАХ.

Расстояние между электродами было 0.3–1 мм. Площадь перекрытия электродов составляла 4×4 мм. Пары цезия из подогретого до температуры 500 К контейнера проходили через 400 отверстий диаметром 100 мкм в эмиттере цезия, который был покрыт графитом для эффективного возбуждения атомов. Температура эмиттера была 800 К и ниже, а температура молибденового электрода 1400 К и ниже.

При работе конвертера межэлектродное пространство наполнялось слабо светящейся цезиевой плазмой. Были получены плотности тока 100–200 А/см² в стационарном режиме и до 500 А/см² в нестационарных условиях. Типичная ВАХ показана на рис. 4 для температуры молибденового электрода 1200 К.

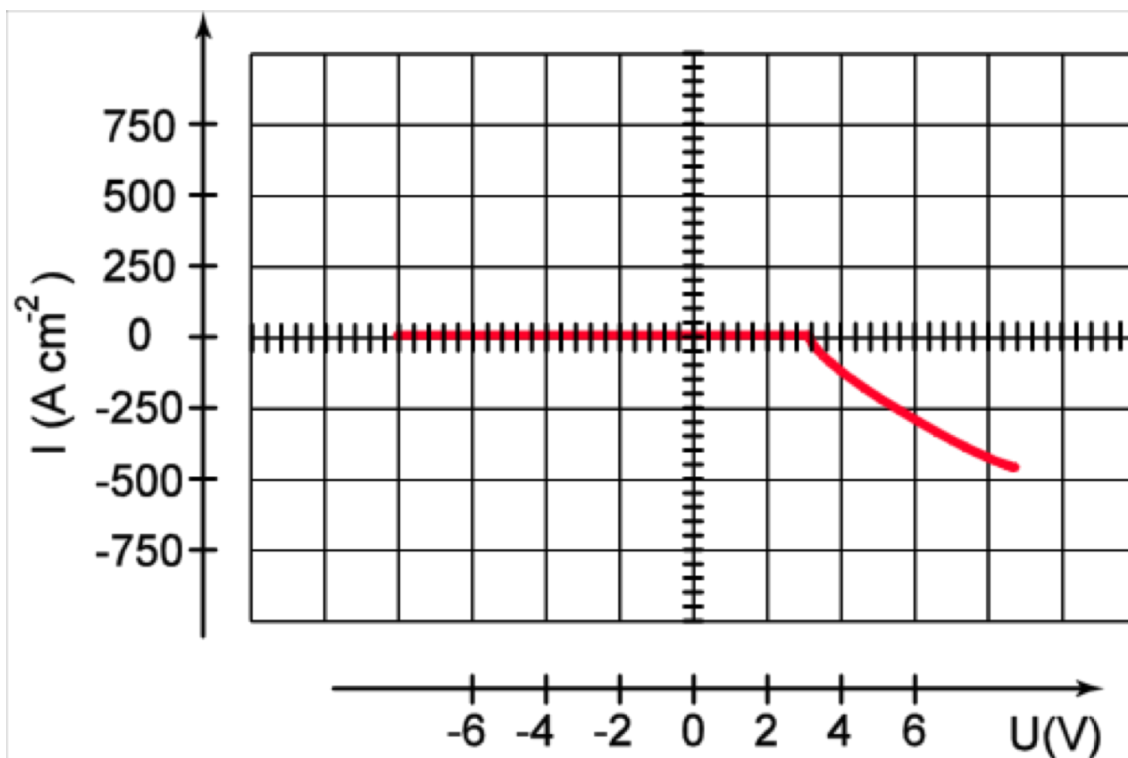


Рис. 4. ВАХ с линейным омическим сопротивлением.

В эксперименте было обнаружено существование низкого омического сопротивления, причем получена оценка удельного сопротивления конденсата от 10^{-3} до 10^{-2} Ом/м. Последнее значение удельного сопротивления наиболее типично. Авторы работы [5] интерпретируют свои результаты на основе гипотезы образования конденсированных возбужденных состояний в межэлектродном пространстве, полагая при этом, что полученное удельное сопротивление соответствует конденсированному возбужденному состоянию.

В работе [6] кластеры конденсата из возбужденных атомов цезия, собирались на охлажденную жидким азотом ловушку (рис. 5).

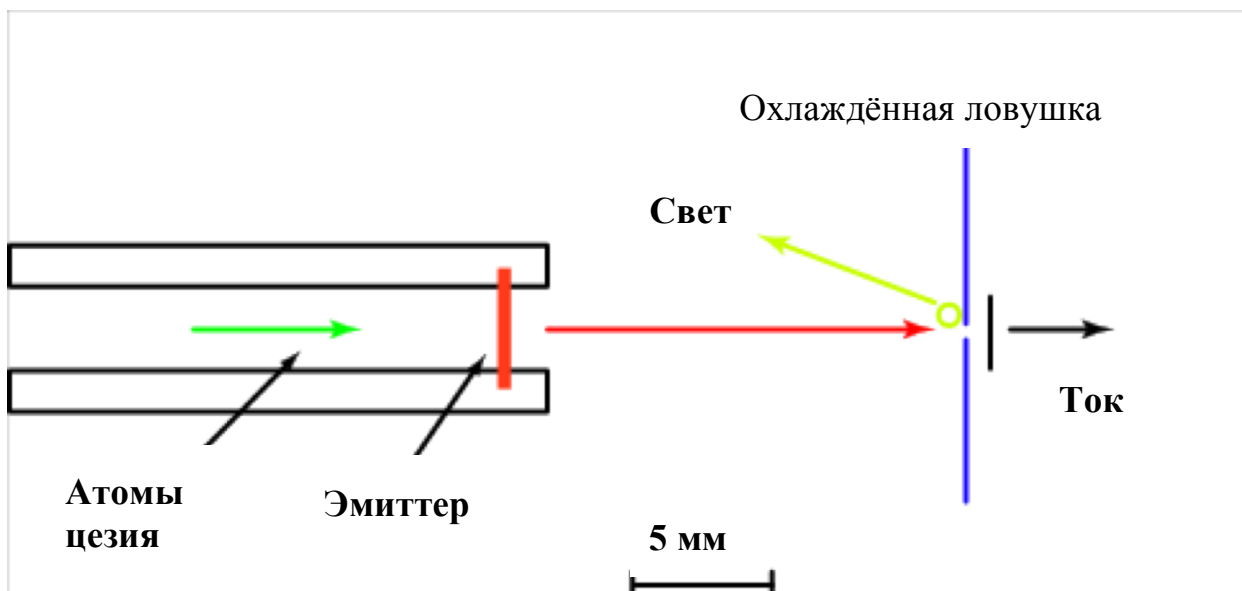


Рис. 5. Схема экспериментов по наблюдению световых вспышек.

При этом визуально наблюдались световые вспышки, главным образом на охлаждаемой азотом поверхности. Большинство вспышек наблюдается в течение первых 15 секунд после отключения напряжения на электроды. При большом времени накопления кластеров вспышки наблюдались в течение 5—10 мин. Диаметр частичек, оценивающийся по вспышкам, около 0.5 мм.

В работе [7] была измерена работа выхода конденсата в термоионном конвертере. Получены оценки работы выхода 0.7–0.5 эВ. Все свои результаты авторы работ [4–7] объясняют получением конденсированной фазы из возбужденных атомов цезия.

Эти эксперименты были повторены группой российских исследователей [21]. Исследование условий образования КВС (конденсированного возбужденного состояния) цезия проводилось в лабораторном термоэмиссионном преобразователе с электродами плоской формы и переменным межэлектродным зазором, содержащим вакуумно–цезиевый тракт подачи цезия и позволяющем в условиях одного эксперимента осуществлять либо равновесную, либо динамическую подачу паров цезия. В экспериментах с динамической подачей паров цезия были установлены эмиссионные

характеристики коллектора и энергетические эффекты в межэлектродной среде, которые в принципиальном плане можно отнести к наблюдаемому шведскими исследователями КВС. Это прежде всего, уменьшение работы выхода коллектора с величины 1.4–1.5 эВ при равновесной подаче паров цезия до величины 1.0–1.1 эВ при динамической подаче и появление капельной плазменной фракции, окрашенной в зеленые тона.

В эксперименте наблюдалось зеленое свечение капельной плазменной фракции в межэлектродном зазоре и в примыкающем к электродам пространстве с характерным размером $d = 1$ см в течение нескольких секунд. Это в 10–100 раз больше времени распада безкластерной плазмы. Следовательно, наблюдаемая в эксперименте плазменная фракция содержала кластеры с массой, соответствующей ≈ 100 атомам. По данным шведских исследователей образующиеся в ридберговской материи кластеры могут содержать несколько сот атомов цезия (до 1000).

Сделанная оценка скорости распада плазмы, по мнению авторов, свидетельствует о наличии капельной плазменной фракции в виде кластеров с массой ~ 100 атомов цезия в возбужденном или ионизированном состоянии.

2.2 Теория ридберговского вещества в плотных системах

В этом параграфе кратко описана модель ридберговского вещества, впервые предложенная в работах [1, 2] (также развитая в более поздних работах [22, 23] и других) для объяснения другого состояния ридберговских атомов, отличного от ридберговской плазмы, полученной в экспериментах [4–7] и [8–11]. Главные принципиальные отличия описанной здесь модели так называемого «конденсированного возбужденного состояния» (далее КВС) заключаются во-первых в пренебрежении температурными эффектами, а во-вторых в очень высокой плотности вещества, при которой становится существенным вырождение электронов.

Ридберговским называется атом, находящийся в высоковозбужденном состоянии (главное квантовое число $k \gg 1$). Одной из особенностей такого состояния является его водородоподобность. Она обусловлена тем, что при больших значениях k внешний электрон удален от положительно заряженного атомного остатка на значительные (по сравнению с основным состоянием) расстояния, и энергетические уровни тем меньше отличаются от водородных, чем больше k . То есть, ридберговское состояние имеет универсальный для всех атомов характер, что сильно упрощает задачу теоретического исследования систем таких атомов [24].

Простейший пример РА — атом водорода H, единственный электрон которого движется в кулоновском поле своего ядра — протона. Энергетический спектр атома водорода $E_n = Ry/k^2$, где Ry — постоянная Ридберга, k — главное квантовое число. В основном состоянии плотность отрицательного заряда, созданного электроном вокруг ядра, распределена сферически симметрично с максимумом в ядре и экспоненциально спадает на периферии. Это известное S -состояние, характерный размер электронного облака в котором называется боровским радиусом (a_0). С увеличением энергии возбуждения по мере перехода к ридберговским состояниям энергетические уровни сближаются. Причем при больших k тоже существуют S состояния, форма электронного облака в них представляет собой тонкий сферически симметричный слой с радиусом $\sim k^2 a_0$

Модель КВС описывает свойства плотного упакованной структуры, характерной для кристаллов твердых тел — кластера ридберговских атомов. Минимально возможный трехмерный кластер из сферических ридберговских атомов состоит из 13 плотно упакованных атомов. Все валентные электроны при этом коллективизированы и сосредоточены в тонких слоях по границам элементарных ячеек (ячеек Вигнера–Зейтца) (рис. 6).

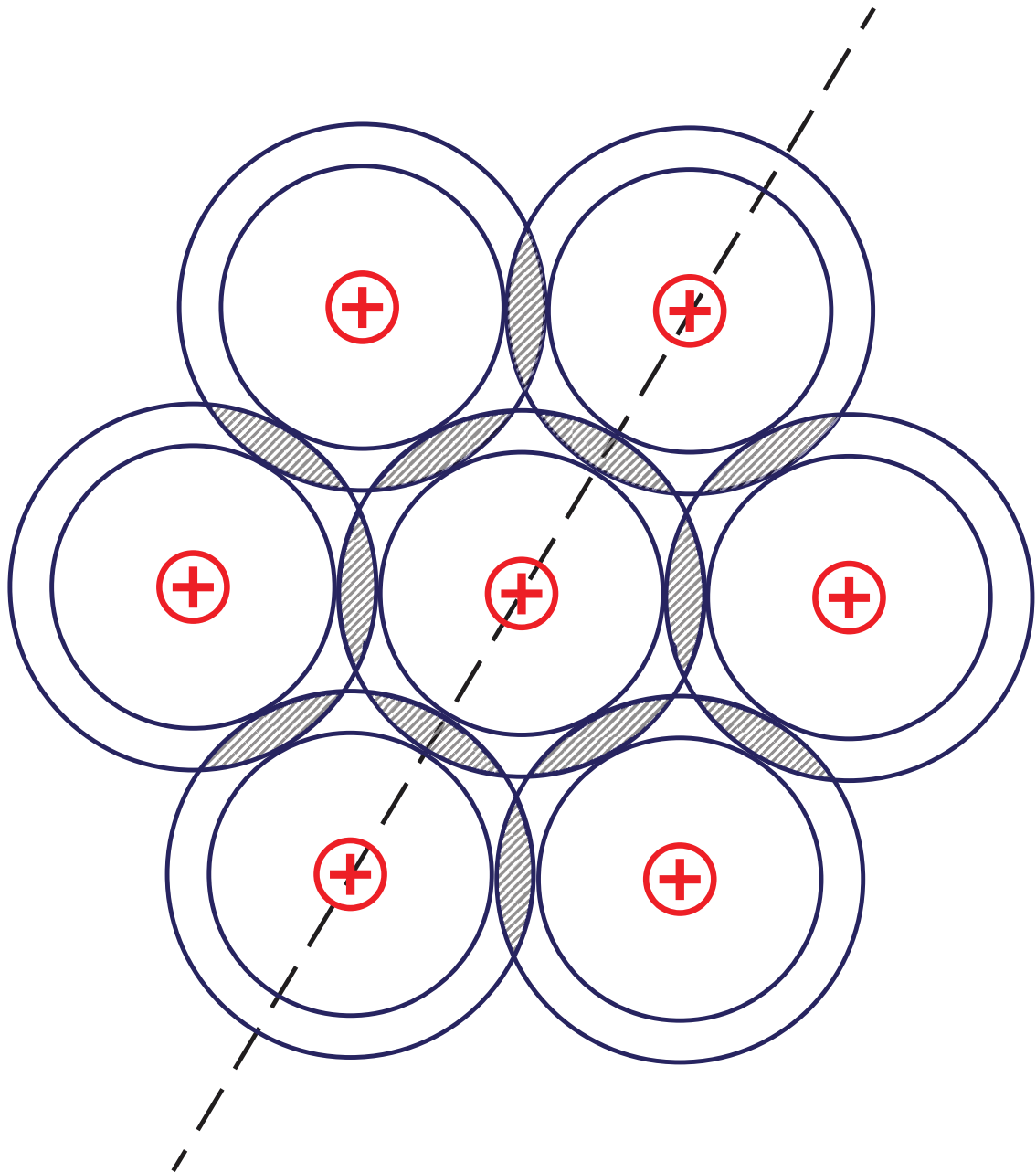


Рис. 6. Кластер из семи ридберговских атомов. Перекрывание электронных оболочек показано штриховкой. Электроны могут двигаться внутри оболочек всех атомов, а не только того, которому принадлежат. Выделенный шестиугольник вокруг центрального ядра — ячейка Вигнера–Зейтца.

В этой модели вместо истинного кулоновского потенциала взаимодействия возможно использование псевдопотенциала Ашкрофта [25]. Это позволяет исключить расходимость в начале координат без существенного влияния на

точность расчетов (т. к. плотность электронного облака в нуле чрезвычайно мала). Введение псевдопотенциала и использование метода функционала плотности позволяет [26] найти распределение электронов, отвечающее минимуму внутренней энергии ридберговского вещества. Эта теория схожа с общим методом расчета соответствующих величин для простых металлов. Отличие состоит в том, что для металлов нижние энергетические состояния ионного остова заполнены электронами, а для КВС — пусты. Однако это не влияет существенно на основные свойства, которые определяются валентными электронами.

Одним из наиболее важных результатов, определяющих свойства этой модели, является сильная неоднородность плотности распределения обобществленных электронов. Численные расчеты показали [1, 2], что распределение заряда и электронный потенциал имеют необычный вид: в тех местах, где электронная плотность имеет максимум, потенциал имеет минимум. Это связано с тем, что обменное взаимодействие втягивает электроны в область их повышенной плотности. Эта особенность обусловлена добавочным вкладом (обменное взаимодействие) в потенциал, называемым потенциалом Слэтера. Этот вклад, в отличие от обычных металлов, становится решающим в ридберговском веществе.

Модель КВС позволяет рассчитать или оценить многие свойства и параметры плотного ридберговского вещества (равновесную плотность, энергию связи, модули упругости, коэффициент поверхностного натяжения, скорость звука, электропроводность и др.) в зависимости от исходного главного квантового числа и в пренебрежении температурными эффектами.

Например, авторы работ [4–7] объясняют низкое омическое сопротивление и другие эффекты получением конденсированной фазы из возбужденных атомов цезия. Однако ридберговские атомы в этих экспериментах не вырождены, а температуры далеко не нулевые. Что делает актуальным вопрос о поиске другой

физической модели, более подходящей для описания обнаруженных свойств, чем описанная в этом параграфе модель КВС.

Далее в диссертации описаны эксперименты для газа ридберговских атомов [8–11] при других температурах и плотностях. Этот газ также отличается отсутствием вырождения частиц. Для условий этих экспериментов была использована модель, учитывающая температурные эффекты и взаимодействие ридберговских атомов при отсутствии вырождения. Эта модель основана на псевдопотенциальной модели неидеальной плазмы [13] и детально описана во второй главе диссертации.

2.3 Эксперименты с системами ультрахолодных ридберговских атомов

В конце 90-х — начале 2000-х появился ряд работ, обнаруживших необычные свойства систем ридберговских атомов при других условиях: крайне низких температурах и низких концентрациях частиц. В работах [8–11] изучалось ридберговское вещество в плазменном состоянии. Вначале создавалась полностью ионизованная плазма, которая затем частично рекомбинировала. При этом образовывались ридберговские атомы, которые существовали длительное время в смеси со свободными электронами и ионами.

В работах [8–10] изучалась плазма ксенона. В разряде получали около 5×10^6 метастабильных атомов Xe (уровень $6S[3/2]_2$ — время жизни 43 сек). Затем их охлаждали с использованием экспериментальных методов, применявшихся в работах по Бозе–Эйнштейновской конденсации [30]. Атомы собирали в магнитооптическую ловушку и охлаждали лазером на переходе $6S[3/2]_2 - 6P[5/2]_3$ (длина волны 882 нм) до температуры 10 мкК (10^{-5} К).

Максимальная плотность атомов достигала $2 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$, при этом распределение по плотностям было гауссовским со среднеквадратичным радиусом 180 мкм.

Для создания плазмы больше 25% атомов было фотоионизовано в течение 10 нс. Сначала заселялся уровень $6P[5/2]_3$, а затем атом ионизовался фотонами с длиной волны 514 нм. Разница энергий между энергией фотона и потенциалом ионизации ΔE распределялась между электронами и ионами. Причем из-за малой величины отношения массы электрона к массе иона, только $4 \times 10^{-6} \Delta E$ получали ионы, а все остальное — электроны. В [8–10] $\Delta E/k_B$ (k_B — постоянная Больцмана) меняли контролируемым образом от 0.1 К до 1000 К. Максимальная концентрация заряженных частиц составила $n = n_e + n_i = 2 \times 10^9 \text{ см}^{-3}$.

На рис. 7а изображен электронный сигнал из ультрахолодной нейтральной плазмы, полученной фотоионизацией от момента времени $t = 0$.

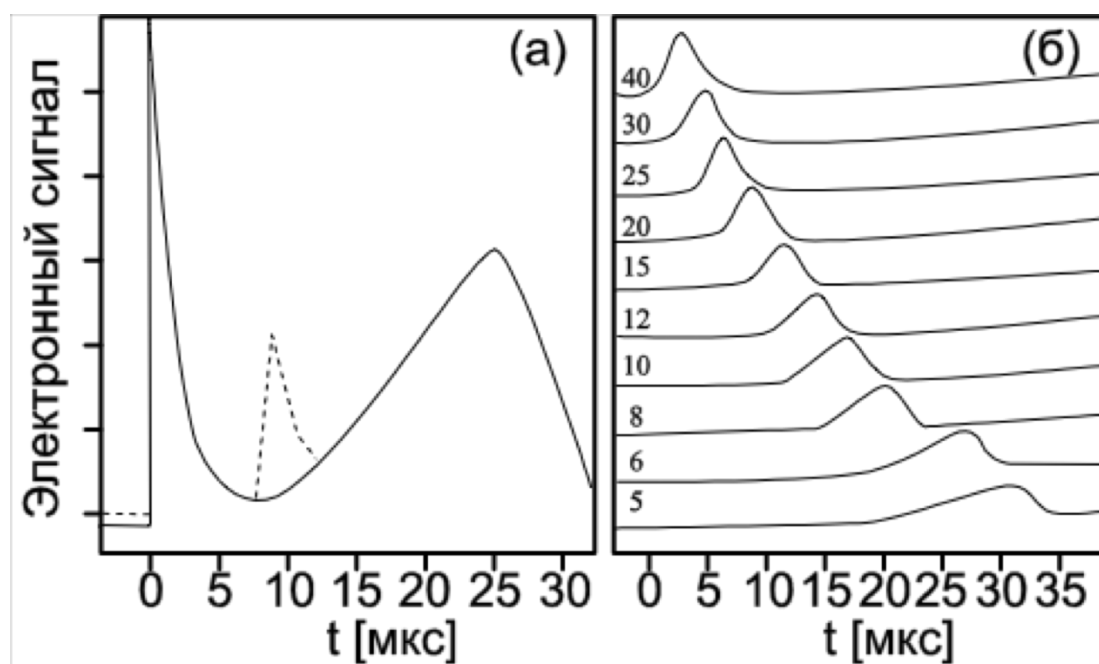


Рис. 7. Электронный сигнал из ультрахолодной плазмы, начиная с ее образования.

а) 3×10^4 см атомов фотоионизовано и $E_e/k_B = 540$ К, сплошная линия при выключенном радиочастотном поле, пунктирная — постоянное радиочастотное поле 5 МГц.

б) 8×10^4 см атомов фотоионизовано и $E_e/k_B = 26$ К, для каждой линии показана частота радиочастотного поля.

Первый пик в сигнале создают электроны, которые попадают в детектор через 1 мкс. В результате, возникновение суммарного положительного заряда в плазме создает кулоновскую потенциальную яму, которая захватывает оставшиеся электроны. Около 90–99% электронов захватывается. При расширении плазмы глубина кулоновской ямы уменьшается. В результате появляется максимум на 25 мкс.

При воздействии постоянного радиочастотного поля появляется дополнительный максимум в электронном сигнале. Это объясняется тем, что воздействие радиочастотного поля вызывает плазменные колебания только в случае частотного резонанса. Амплитуда коллективного электронного движения существенно меньше размера облака частиц σ . Приобретенная энергия перераспределяется между электронами за времена 10–1000 нс, увеличивая их температуру. Это приводит к увеличению скорости испарения электронов из кулоновской ямы, что создает плазменные осцилляции, как видно на электронном сигнале. Резонансный отклик приходит позже при уменьшении частоты поля (рис. 7 б), т. к. средняя плотность падает со временем.

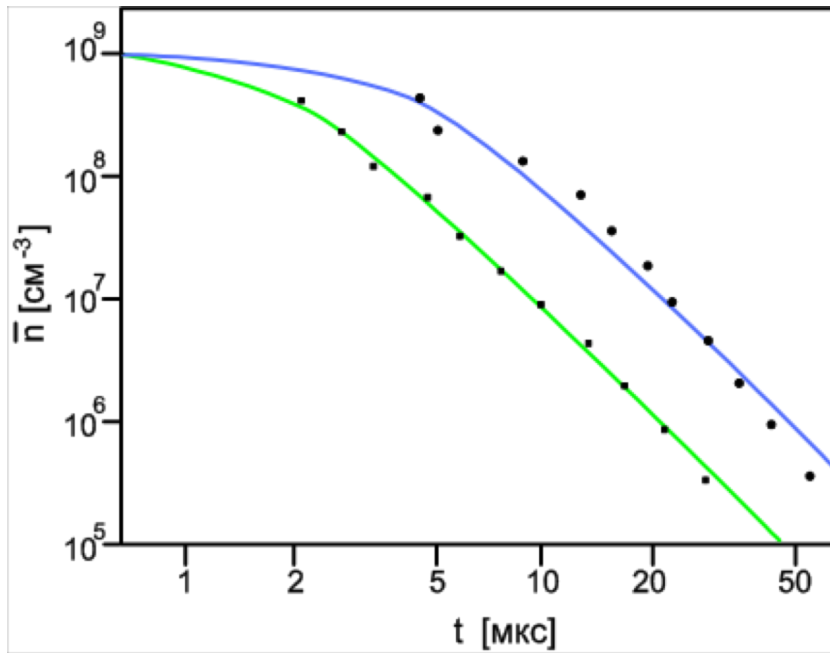


Рис. 8. Зависимость средней плотности расширяющейся плазмы от времени. Количество фотоионизированных атомов $N = 5 \times 10^5$. Кружки — $E_e/k_B = 3.9K$, квадратики — $E_e/k_B = 316K$. Сплошные линии — соотв. теоретические кривые.

На рис. 8 построена функция зависимости средней плотности электронов от времени. Эти данные хорошо описываются однородно расширяющимся облаком частиц, плотность которого меняется по закону $\bar{n} = N / [4\pi(\sigma_0^2 + v_0^2 t^2)]^{3/2}$, где σ_0 — начальный среднеквадратичный радиус, а v_0 — среднеквадратичная радиальная скорость. N определяется независимо из подсчета нейтральных атомов до и после фотоионизации. Полученные для σ_0 значения совпадают с размером начального атомного облака, средняя кинетическая энергия на частицу $3mv_0^2/2$. В [8–10] также было обнаружено аномальное замедление рекомбинации в полученной плазме при $\gamma \geq 1$. Время рекомбинации составляло 100 мкс. Оценка времени рекомбинации по формуле, справедливой для разреженной плазмы, составляет наносекунды [31].

В [11] была получена плазма, аналогичная [8–10] в щелочных металлах Rb и Cs, путем возбуждения газа холодных атомов ($T_a \sim 10^{-4} K$) на ридберговский уровень энергии (уровень $n = 36–40$). Эксперимент проводился с использованием

лазерного охлаждения. Для получения плазмы в газ добавляли 1% возбужденных атомов при $T \sim 300$ К. Систему исследовали при помощи коротких электрических импульсов, которые вырывали из плазмы слабо связанные электроны. В этой работе было показано, что смесь холодных возбужденных атомов и небольшого числа горячих атомов переходит в холодную плазму. Эти эксперименты говорят о том, что плотные системы ридберговских атомов могут переходить в состояния подобные аморфным металлоподобным структурам.

В [31] представлен новый метод для изучения ультрахолодной плазмы. При помощи методики абсорбционного изображения изучалась динамика ионов в ультрахолодной плазме. Для создания плазмы атомы Sr охлаждали до температуры 20 мК в магнитооптической ловушке, максимальная плотность достигала 10^{10} см⁻³, количество захваченных атомов 10^8 . Затем при помощи импульсного лазера на красителях плазму ионизовали. Ионы Sr⁺ поглощали зондирующий лазерный пучок на переходе $^2S_{1/2} - ^2P_{1/2}$, (длина волны 422 нм), затем плазма высвечивала и изображение попадало на CCD камеру. Далее определялась оптическая глубина, как отношение интенсивности зондирующего луча к интенсивности высвечивания этого луча через плазму. Затем измеряли зависимость оптической глубины от изменения частоты лазера для различных времен от создания до распада плазмы. Это позволило получить информацию о динамике плазмы. В первые 250 нс после создания плазмы температура ионов быстро увеличивается до установления равновесия.

В [33] изучалась электронная температура в ультрахолодной плазме. 4×10^6 метастабильных атомов Xe при температуре 20 мК собирали в магнитооптической ловушке аналогично схеме экспериментов [8–10]. Затем около 30% было фотоионизовано лазером на красителях.

Был предложен новый метод для определения температуры электронов. Этот метод позволяет определять распределение электронов по энергиям при помощи внешнего ~ 0.3 –4 В/м электрического поля. Это поле немного меньше

величины потенциального барьера для электронов в исследуемой плазме. В результате резкого увеличения внешнего поля электроны с большей кинетической энергией могут вырваться. Эти электроны попадают в детектор. По всплескам электронных сигналов можно определить температуру электронов в плазме. Были получены зависимости параметра взаимодействия и температуры электронов от времени в расширяющейся плазме при разных начальных температурах $T = 10\text{--}300$ К. Было показано, что в процессе расширения плазмы температура падает, а параметр взаимодействия слабо растет до величины 0.1–0.15, так что полученная плазма не является сильно связанной.

2.4 Теоретические работы по ультрахолодной ридберговской плазме

Выше были описаны различные экспериментальные работы, связанные с ионизованной ридберговской плазмой и основные результаты этих работ. В данном параграфе рассмотрены существующие теоретические подходы, пытающиеся их описать.

В [34–41] обсуждались и были предложены различные кинетические модели описания полученных в [8–10] результатов. Эти результаты можно разделить на две группы. Первая группа работ [34–39] основывается на том, что рекомбинация, протекающая в плазме сразу после ее образования, приводит к увеличению кинетической энергии электронов. Тем самым она приводит к росту T_e и увеличению кинетической энергии ионов.

В работе [34] исследовалась возможность формирования сильно связанной плазмы ионов. Рассматривались экспериментальные результаты [8–10]. При этом предполагалось, что в эксперименте электронная и ионная подсистемы взаимодействуют очень слабо. На основе результатов расчета, полученных в [42], утверждается, что скорость обмена энергией этих подсистем сильно занижается, из-за того, что подсистемы сильно связаны, и следовательно плазма

является двух температурной. Авторы далее выстраивают эволюцию плазмы в эксперименте: $\tau_{\text{ion}} \sim \tau_e \ll \tau_i \ll \tau_{\text{exp}} < \tau_{\text{rec}}$, где τ_{ion} — время ионизации, τ_e и τ_i — времена установления электронной и ионной температуры соответственно, τ_{exp} — время начала расширения плазмы, τ_{rec} — время начала рекомбинации. Далее из-за малого параметра взаимодействия для электронов используется модель линейного экранирования [43]. Это согласуется с моделью Юкавы, в которой взаимодействие между ионами происходит через потенциал $u_Y(r) = e^2 \exp(-r/r_D)/r$, где $r_D = \sqrt{T_e / 4\pi n e^2}$ — радиус Дебая.

Модель Юкавы описывается гамильтонианом [34]:

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m_i} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{k \neq 0} \frac{v(k)}{\varepsilon(k)} [n(\vec{k})n(-\vec{k}) - N] + F_e - NT\Gamma \frac{K}{2} \quad (2.1)$$

где $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ — радиус Вигнера–Зейтца, $K = a/r_D$, $v(k) = 4\pi e^2/k^2$ — кулоновское взаимодействие $\varepsilon(k) = 1 + (k^2 r_D^2)^{-1}$ — электронная диэлектрическая проницаемость, $n(\mathbf{k}) = \sum_m \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_m)$ ионная плотность в Фурье пространстве, $\Gamma = e^2/(aT)$ — кулоновский параметр связи (Coulomb coupling parameter), F_e — свободная энергия Гельмгольца однородного электронного газа, и последнее слагаемое — свободная энергия, связанная с облаком экранирования.

Из выражения (1.1) авторы выводят оценку для конечной температуры

$$T_f \approx T_i - \frac{2}{3} T_f \Gamma U_{ex} \quad (2.2)$$

где T_f — конечная температура, T_i — начальная температура.

Дополнительная энергия $u/\Gamma = U_{ex} - k/2$ — была получена в [40] при помощи метода молекулярной динамики. Численный расчет основан на использовании уравнения движения ионов в интервале времени между τ_e и τ_{exp} :

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = e^2 \sum_{m \neq n} \vec{r}_{nm} \frac{\exp(-r_{nm}/r_d)}{r_{nm}^3} (1 + r_{nm}/r_d) \quad (2.3)$$

где m_i — масса иона и $r_{nm} = r_n - r_m$ межчастичное расстояние. В процессе численного моделирования кинетическая температура определялась, как:

$$T_{ion}(t) = \frac{m_i}{2N} \sum_n v_n^2(t) \quad (2.4)$$

где N — число частиц, v_n — скорость n -й частицы.

В результате расчета было показано, что при переходе от неупорядоченной структуры в упорядоченную при условии сохранения полной энергии системы частиц происходит понижение потенциальной энергии. Увеличение за счет этого кинетической энергии тяжелых медленных частиц значительно больше, чем увеличение кинетической энергии за счет обмена энергией с легкими быстрыми частицами (рис. 9).

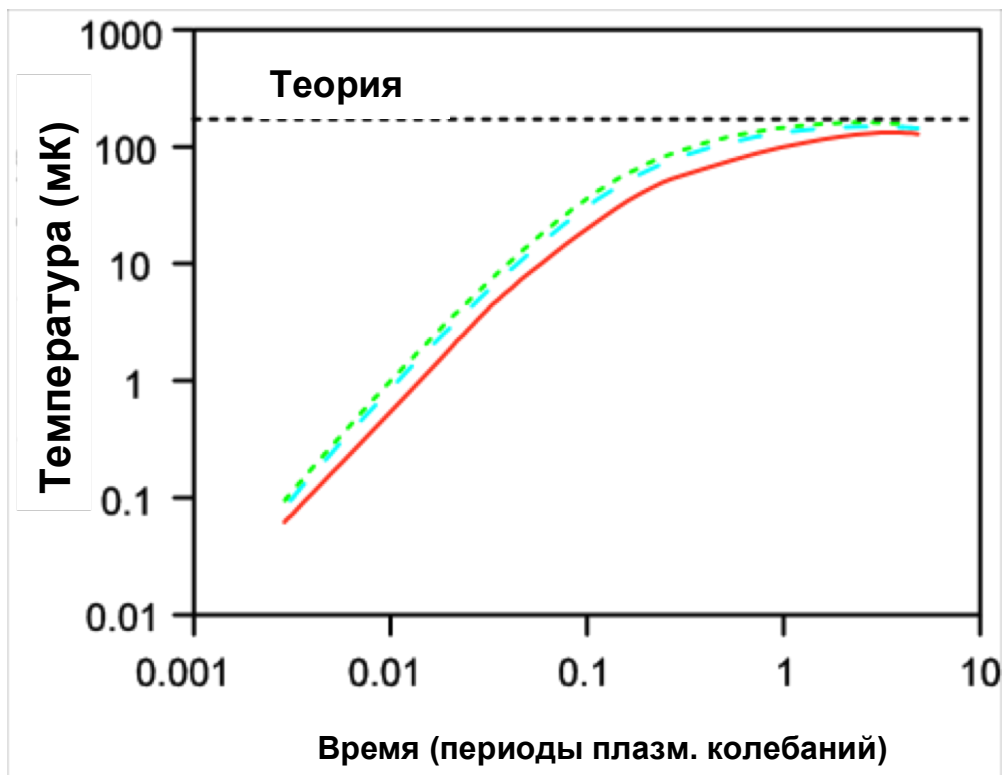


Рис. 9. Ионная температура в зависимости от времени. Короткий пунктир соответствует концентрации $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$, длинный пунктир — $n = 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$, сплошная линия — $n = 10^8 \text{ см}^{-3}$. Теоретически рассчитанная температура в последний момент времени при $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$ — горизонтальная пунктирная прямая.

Также авторы предсказывают образование дальнего порядка в системе при $\Gamma \gg 1$ (рис. 10).

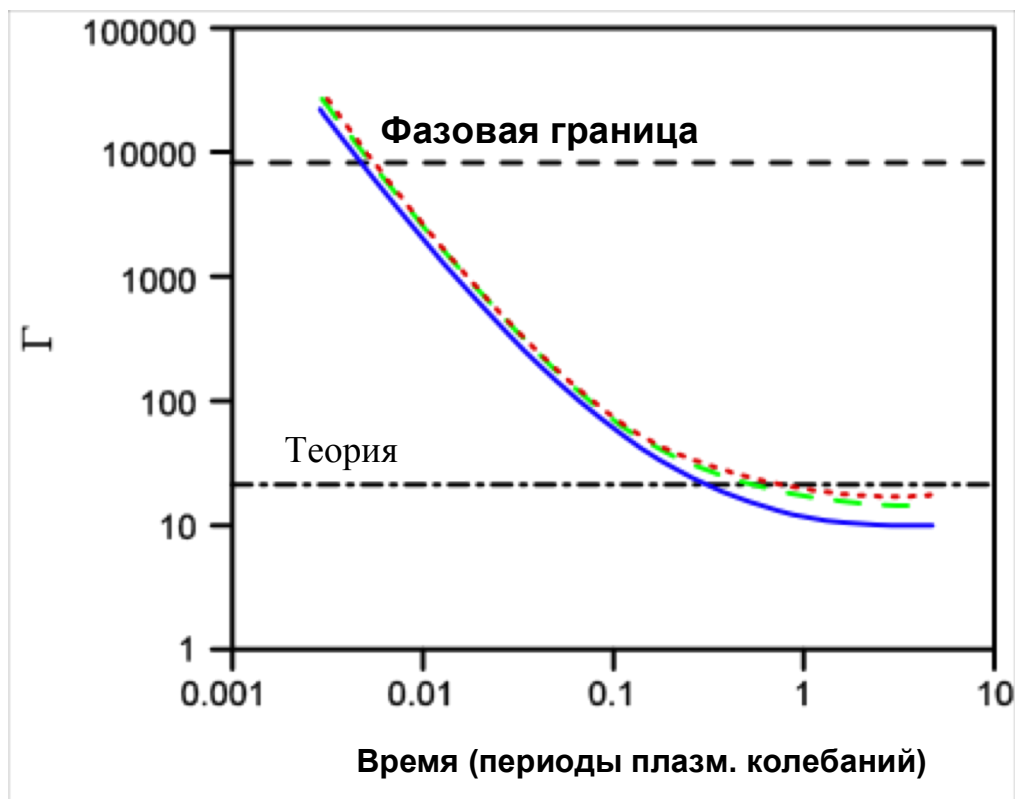


Рис. 10. Параметр неидеальности для ионов в зависимости от времени. Короткий пунктир соответствует концентрации $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$, длинный пунктир — $n = 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$, сплошная линия — $n = 10^8 \text{ см}^{-3}$. Также на графике представлен теоретически предсказанный параметр неидеальности в последний момент времени при $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$ и фазовая граница.

В работе Кузьмина и О'Нила [35] обсуждаются результаты, приведенные в работе [34]. Авторы [35] согласны с тем, что разогрев системы происходит в результате высвобождения корреляционной энергии частиц. Однако в [34] не учитываются процессы, связанные с рекомбинацией электронов. Авторы [35] считают процесс трехчастичной рекомбинации очень быстрым и главным в разогреве системы. Начальный разогрев предполагается за времена порядка обратной величине плазменной частоты $\omega_p^{-1} \sim a / \sqrt{e^2 / am_e}$. Для численного расчета использовался метод классической молекулярной динамики,

аналогичный тому, который применяется в астрофизике при аналитическом расчете кеплеровских орбит двойных звёзд. Как утверждают авторы, двойные звезды являются аналогом высоковозбужденных ридберговских состояний. Энергия возбуждения, до которого авторы проводят расчет $E_{binding}/(e^2/a) = 25$, эта энергия соответствует уровню энергии возбуждения атома водорода $n = 43$. Временной масштаб, в котором проводят расчет, $t_{max} \omega_p = 70.9$, что соответствует $t_{max} = 5 \times 10^{-8}$ сек. На рис. 11 представлен график зависимости обратной величины параметра взаимодействия $\Gamma_e = 1.67 \gamma$ в зависимости от времени.

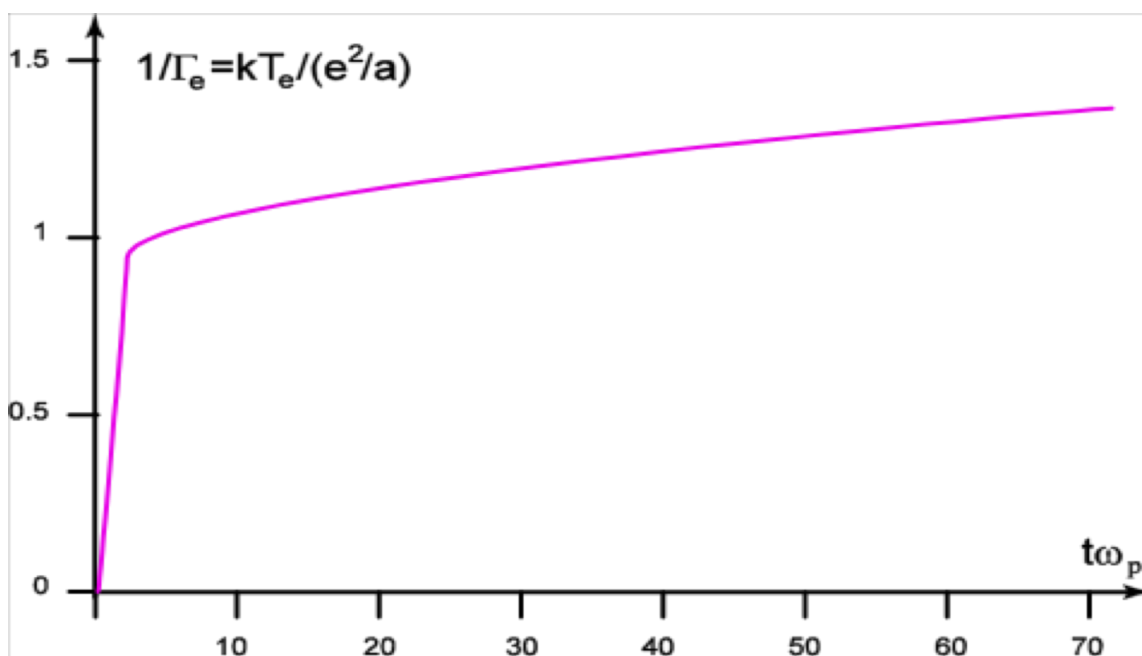


Рис.11. Безразмерная температура в зависимости от безразмерного времени [35].

Вначале происходит установление температуры, а затем плавный разогрев за счет трехчастичной рекомбинации.

В работе Робишо с соавторами [36], также рассматривались эксперименты [8–10]. Авторы проделали численный расчет, использующий пакет программ: программа для расчета динамики электростатических частиц методом Монте–Карло для модели кулоновских столкновений, программа для расчета динамики

изотермической жидкости, и итоговая программа, использующая оценочные уравнения. Во всех этих расчетах ионы рассматриваются, как жидкость при нулевой температуре, т. к. ионная тепловая энергия остается малой по сравнению с радиальной кинетической энергией обусловленной расширением плазмы. Главным результатом этих расчетов стало число и температура тех электронов, которые остаются после быстрого разрушения и испарения из плазмы. В качестве доказательства используются результаты работы [34]. Была также обнаружена очень быстрая термализация электронов в масштабе времени разлета ионов, при $E_e < 200$ К.

В работе [37] при анализе эксперимента [10] авторы исходили из предположения, что времена релаксации высоковозбужденных состояний, для которых проводились измерения, значительно меньше времени релаксации плотности N_e и температуры T_e свободных электронов. Это позволяет найти временные зависимости $N_e(t)$ и $T_e(t)$ с учетом рекомбинации и рекомбинационного нагрева, используя измеренные в экспериментах скорости разлета плазменного сгустка. По вычисленным значениям $N_e(t)$ и $T_e(t)$ авторы [37] определяли плотность ридберговских атомов и сравнивали ее с экспериментальными данными. Рассмотрение зависимости плотности электронов от времени, как и в более ранних работах [38], не позволило сделать вывод о том, насколько была интенсивной рекомбинация.

Следует отметить, что использованная модель не позволяет описать немонотонный ход температуры при $t \approx 10$ мкс. Авторы [37] утверждают, что это связано с тем, что не учитывается явная зависимость энерговыделения на акт рекомбинации от времени. Немонотонная зависимость температуры электронов от времени, связанная с нестационарностью энерговыделения, известна для обычной плазмы. Она была предсказана в работе [44] на основе моделирования послесвечения плазмы гелия, а затем подтверждена экспериментально [45].

В работе [39] для теоретического исследования [8–10] использовались численные модели, подобные тем, что были предложены в [36]. Их главным отличием является учет ион–ионного взаимодействия, а также процессов ионизации и рекомбинации. Для проверки этой модели была разработана другая, более точная, но и более сложная модель расчета. Расчеты были осуществлены методом молекулярной динамики для ионов при условии, что электроны представляют собой жидкость в квазистабильном состоянии.

Рассматривалась плазма, состоящая из $N_e = 37500$ электронов и $N_i = 40000$ ионов со средней концентрацией $n = 10^9 \text{ см}^{-3}$. Кинетическая энергия электронов составляла $E_e/k_B = 3T_e/2 = 20 \text{ К}$. Основным результатом, к которому привели расчеты для обеих моделей, стало распределение заселенности ридберговских атомов (рис. 12).

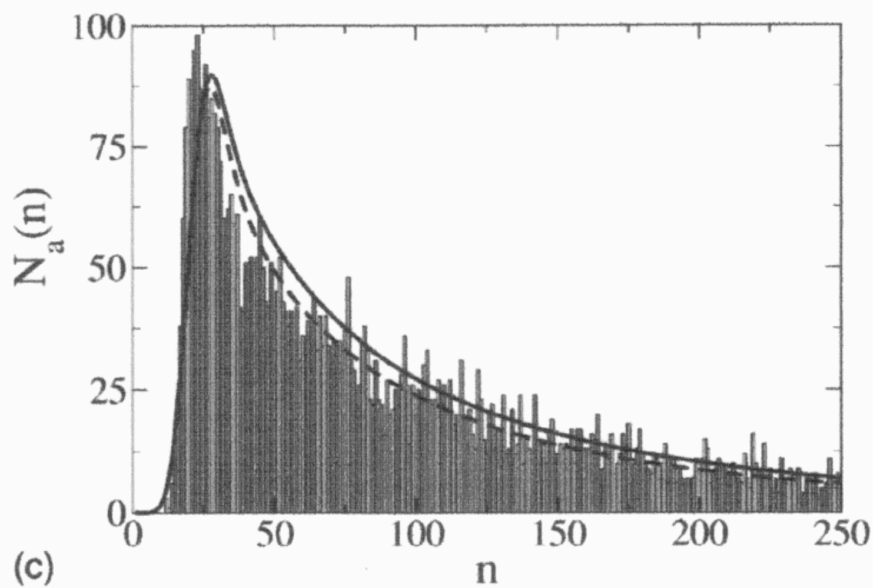


Рис.12. График зависимости количества ридберговских атомов N_a от главного квантового числа n . Время прошедшее с момента создания плазмы $t = 40 \text{ мкс}$.

В результате наблюдается небольшое количество рекомбинировавших атомов $\sim 10\%$ от общего числа частиц, а также инверсная заселенность на уровне $n \approx 25$.

В [48] было установлено, что расчет рекомбинации при $T \sim 1$ К в предположении квази–непрерывного, а не дискретного распределения связанных состояний становится некорректным при главном квантовом числе $k \leq 50$. Это связано с тем, что для $k \leq 50 \Delta E_k/T > 1$. Вероятность перехода электрона на более низкий уровень в этом диапазоне за счет столкновений определяется $\exp(-\Delta E_k/T)$ и становится очень малой. Процесс рекомбинации резко замедляется. В связи с этим результаты, полученные в [36–38] и рассчитанные до $k \geq 43$ и при $t \leq 10^{-7}$ сек (граничное время определено для условий [8–10]) нельзя экстраполировать до $t \sim 10^{-6}$ сек.

Вторая группа работ [40, 41] предполагает, что в плазме в момент ее образования кулоновское отталкивание между ионами приводит к большой положительной потенциальной энергии электронов. При расширении плазмы потенциальная энергия частиц превращается в кинетическую. В плазме образуется ионная решетка с размером равным среднему расстоянию. Вычисленная энергия на одну частицу положительна и константа (аналог константы Маделунга) равна 11 ± 5 . Предположение о существовании ионной решетки не совсем корректно, т.к. непонятна роль электронов в структуре рассматриваемой плазмы. Скорее следует ожидать, что кристаллическую структуру образуют заряды обоих знаков, и учет их вклада в расчет энергии может привести как к положительным, так и отрицательным значениям E .

Выводы

Из приведенного обзора можно сделать вывод о том, что, с одной стороны, в экспериментальных работах по ридберговской плазме наблюдается дефицит данных, касающихся микроскопических параметров системы, например структурных свойств, динамики энергии электронной и ионных подсистем и т. п. Это дает простор для различных гипотез, объясняющих полученные

коллективные свойства (например, замедление рекомбинации и низкое омическое сопротивление).

С другой стороны, теоретические работы в попытках объяснить результаты экспериментов акцентируют внимание прежде всего на процессах рекомбинации, пытаясь смоделировать кинетику системы в различных приближениях.

Не используя при этом возможность рассмотреть систему в неполном термодинамическом равновесии и численно рассчитать равновесные свойства плазмы из первых принципов.

Глава 3. Модифицированная псевдопотенциальная модель

В этой главе описывается разработанная модель взаимодействия ридберговской плазмы, основанная на псевдопотенциальной модели неидеальной плазмы [13]. Рассчитываются парные псевдопотенциалы взаимодействия для различных параметров из условий экспериментов. Проводится сравнение псевдопотенциалов, рассчитанных в квазиклассическом приближении, с результатами точного расчёта матрицы плотности и оценивается область применимости приближённого расчёта для условий [8–10].

Следует особо подчеркнуть, что в этой главе решается модельная задача — описать взаимодействие в системе высоковозбуждённых водородоподобных ридберговских атомов, свободных электронов и ионов. С учетом возможности (или невозможности) образования ряда уровней дискретного спектра и в широком диапазоне температур и концентраций.

Результаты решения этой задачи представляют самостоятельную ценность. Например, они могут быть применены не только для оценки результатов экспериментов, но и для объяснения некоторых свойств реальных систем и предположений о новых свойствах. Полученным при разработке термодинамики модели результатам посвящена четвертая глава диссертации.

3.1 Псевдопотенциальная модель двухкомпонентной плазмы

В классической статистической механике все термодинамические величины могут быть получены из конфигурационного интеграла

$$Q_N = \int_V d^{(N)}\vec{q} e^{-\beta\Phi_N}, \quad (3.1)$$

где $\beta = 1/T$, а Φ_N потенциальная энергия взаимодействия N частиц.

В квантовой статистике выражение (2.1) заменяется на

$$Q_N = \int_V d^{(N)}\vec{q} S_N(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N; T) \quad (3.2)$$

где S_N — т. н. слэтеровская сумма:

$$S_N \sim \sum_n |\Psi_n(q_1, \dots, q_N)|^2 \exp[-\beta E_n(N)] \quad (3.3)$$

$\Psi(r)_n$, E_n — волновые функции и собственные значения энергии для системы частиц.

Суммирование в (3.3) проводится по полной совокупности ортонормированных волновых функций.

Для системы двух частиц:

$$S_2(r, T) \sim \sum_n |\Psi_n(r)|^2 \exp[-\beta E_n], \quad (3.4)$$

где Ψ_n , E_n — волновые функции и собственные значения энергии двух частиц, взаимодействующих при помощи потенциала $\Phi(r)$. Суммирование в (3.4) проводится по всем состояниям дискретного и непрерывного спектра.

Если представить формально слэтеровскую сумму в виде классической плотности вероятности, получим выражение для парного псевдопотенциала:

$$\Phi^*(r, T) = -kT \ln S_2(r, T) \quad (3.5)$$

В классическом пределе $T \rightarrow \infty$ псевдопотенциал $\Phi^*(r, T)$ совпадает с потенциалом $\Phi(r)$. При конечных T $\Phi^*(r, T)$ совпадает с $\Phi(r)$ при $r \geq \lambda = \hbar / \sqrt{mkT}$ (\hbar — постоянная Планка, m — масса частицы).

На расстояниях $r \leq \lambda$ классическая плотность вероятности $e^{-\beta\Phi(r)}$ отличается от квантово-статистической плотности вероятности $S_2(r, T)$ вследствие парных

квантовых эффектов. Эти эффекты обусловлены, во-первых, возможностью образования связанных состояний, а во-вторых, неопределенностью положения частицы в области размером λ .

Отличие S_2 от $e^{-\beta\Phi(r)}$ или $\Phi^*(r, T)$ от $\Phi(r)$ может быть не только количественным, но и качественным. Например, в случае электрон-протонного взаимодействия $\Phi^*(r, T)$ конечен при $r = 0$, а $\Phi(r) = \infty$. По аналогии с классическими статистическими системами многих частиц, естественно рассмотреть, в нулевом приближении, физическую модель, в которой взаимодействие между частицами описывается парным псевдопотенциалом $\Phi^*(r, T)$.

Слэтеровская сумма системы частиц в этой модели запишется следующим образом:

$$S_N^0 = \prod_{i < j} S_2(r_{ij}) = \exp\left(\beta \sum_{i < j} \Phi^*(r_{ij}; T)\right) \quad (3.6)$$

Если в системе возможно образование связанных состояний, то такое нулевое приближение недостаточно. В этом случае можно рассмотреть совокупность свободных частиц и возможных связанных состояний между ними, которые дают вклад в термодинамические свойства. Различным связанным состояниям соответствует определенная статистическая сумма, выбор которой определяет взаимодействие между частицами.

Например, если рассматриваются связанные состояния двух взаимодействующих частиц, то им соответствует статистическая сумма, которая выбирается следующим образом. Слэтеровская сумма $S_2(r, T)$ разбивается на две части:

$$S_2(r, T) = S_2^b(r, T) + S_2^f(r, T) \quad (3.7)$$

$S_2^b(r, T)$ — определяет статистическую сумму связанных состояний:

$$\Sigma_2 \sim \int_0^\infty S_2^b(r, T) r^2 dr \quad (3.8)$$

а $S_2^f(r, T)$ определяет модифицированный псевдопотенциал взаимодействия между свободными частицами $\Phi^*(r, T) = \frac{1}{\beta} \ln S_2^f(r, T)$. Конкретные способы разбиения $S_2(r, T)$ будут обсуждены ниже.

Между связанными состояниями (атомами, молекулами и т.д.) можно учесть взаимодействие в виде псевдопотенциалов, рассчитанных на основе известных потенциалов взаимодействия (например, потенциалов, полученных из экспериментальных данных по рассеянию и спектральных измерений). Связь между числом свободных и числом связанных частиц устанавливается при помощи условий химического равновесия.

Таким образом, псевдопотенциальная модель невырожденной неидеальной квантовой системы описывает совокупность N_1 — свободных частиц, N_2 — парных связанных состояний, N_3 — тройных связанных состояний и т.д., находящихся в условиях химического равновесия. Свободные частицы взаимодействуют между собой при помощи модифицированных псевдопотенциалов $\Phi^*(r, T)$; связанным состояниям (атомам, молекулам, молекулярным ионам и т.д.) соответствует определенным образом выбранная статистическая сумма и они взаимодействуют между собой и со свободными частицами при помощи соответствующего набора псевдопотенциалов взаимодействия.

Термодинамические величины для такой модели могут быть рассчитаны при помощи численных методов. Использование результатов для выбранной

физической модели возможно, если известны границы применимости. В этом случае приходит на помощь термодинамическая теория возмущений.

Квантовые эффекты, рассмотренные выше, проявляются на расстояниях между частицами $\sim \lambda$. Так как в невырожденных системах $n\lambda^3 < 1$, то все отличие термодинамических величин, следующих из точного выражения (3.2), от термодинамических величин для выбранной физической модели определяется разницей во взаимодействии частиц на малых расстояниях. Парные слэтеровские суммы в случае электрон–ионных, электрон–электронных и ион–ионных взаимодействий могут быть рассчитаны точно. При этом псевдопотенциал на больших расстояниях совпадает с законом Кулона, а на малых конечен и зависит от температуры.

Важно подчеркнуть, что так введенный псевдопотенциал не является истинным потенциалом взаимодействия между частицами в системе. Это не более чем наглядный способ представления конфигурационного интеграла в системе взаимодействующих частиц. Этот способ позволяет при определенных допущениях рассчитывать некоторые свойства квантовых систем в классическом приближении (например, методом Монте–Карло).

Псевдопотенциалы парных электрон–электронных, протон–протонных и электрон–протонных взаимодействий будут рассчитаны в условиях [8–10] далее.

3.2 Обоснование расчета термодинамических свойств и особенности модели

Прежде чем переходить к расчёту термодинамических свойств ридберговской плазмы, необходимо обосновать правомерность расчёта термодинамики и задать границы применимости вышеописанной модели. В [8–10] система, вообще говоря, не равновесна, т. к. нет равновесной заселенности электронов по уровням возбужденного атома.

В данном параграфе сформулированы и обоснованы важные особенности разработанной модели: обоснована правомерность расчета термодинамических свойств в условиях неполного термодинамического равновесия, показана правомерность исключения ряда водородоподобных уровней дискретного спектра при расчете взаимодействия и даны временные рамки применимости результатов к объяснению свойств экспериментальных систем [8–10].

В работах [8–10], где изучалась плазма Хе, образованная при многофотонной ионизации атомов, было обнаружено аномальное замедление рекомбинации. Время рекомбинации составляло > 100 мкс. В работе [11] изучалась плазма Cs и Rb.

В этих экспериментах достигались также параметры n_e и T_e , при которых плазма является сильнонеидеальной. В такой плазме отношение средней потенциальной энергии частиц к кинетической энергии (параметр взаимодействия):

$$\gamma = \beta e^2 n^{1/3},$$

где $\beta = 1/(k_B T_e)$ — обратная температура, e — заряд электрона существенно больше 1 (при $T_e = 0.1$ К и $n_e = 2 \cdot 10^9$ см⁻³ получаем $\gamma = 21$).

В то же время электроны в этой плазме не вырождены. Отношение длины волны де Бройля электрона к среднему расстоянию между частицами (параметр вырождения) существенно меньше единицы, при $T_e = 0.1$ К и $n_e = 2 \cdot 10^9$ см⁻³:

$$n_e^{1/3} \lambda_e = \frac{n_e^{1/3} \hbar}{\sqrt{2m_e k_B T_e}} = 0.2 \cdot 10^{-2}$$

В сильнонеидеальной плазме при таких параметрах γ неприменимы все имеющиеся оценки каких-либо процессов, основанные на формулах, полученных в приближении $\gamma \ll 1$.

Кроме того, плазма, полученная в [8–10], сильно неравновесна как по температуре, так и по заселенностям. Это связано с тем, что электроны в результате ионизации атомов получают дополнительно кинетическую энергию от 1 до 1000 К, а ионы остаются при температуре атомов 10^{-5} – 10^{-4} К. В созданной плазме [8–10] в начальный момент времени все электроны находятся в непрерывном спектре, и отсутствует T_e .

В [11] полученная плазма также неравновесна. За счет взаимодействия холодного газа возбужденных атомов с 1 % возбужденных атомов при комнатной температуре происходит изменение заселенностей энергетических уровней возбужденных атомов, а также их ионизация.

Вообще говоря, установление полного термодинамического равновесия требует некоторого времени, масштабом которого служит время релаксации. Времена релаксации для возбуждения различных степеней свободы, а также ионизации, рекомбинации, диссоциации часто очень сильно отличаются. Поэтому возможны такие условия, когда термодинамическое равновесие устанавливается не во всех, а только в части протекающих процессов. Быстрее всего равновесие устанавливается в поступательных степенях свободы частиц. Если при данных температуре и плотности переходить от быстрых к более медленным релаксационным процессам, то обычно можно установить такую последовательность: поступательные степени свободы, вращения молекул, диссоциация и химические реакции, ионизация и электронное возбуждение. В некоторых случаях времена релаксации бывают настолько большими, что неравновесное состояние системы оказывается весьма устойчивым [46].

Наиболее быстрым процессом при установлении равновесия в плазме является процесс установления электронной температуры. Для слабонеидеальной плазмы ($\gamma \ll 1$) время установления T_e определяется следующим выражением [47]:

$$\tau_{ee} \cong \frac{(T_e)^{3/2} m_e^{1/2}}{8n_e e^4 L_e}, \quad (3.9)$$

где L_e — кулоновский логарифм, для которого в этих условиях справедливо следующее выражение:

$$L_e = \ln \frac{1}{2\sqrt{\pi} \gamma_e^{3/2}}, \quad (3.10)$$

и $\gamma_e = e^2 n_e^{1/3} / kT_e$. При $\gamma_e^3 \geq 1/4\pi$ выражения (3.9) и (3.10) теряют смысл, так как $L_e = 0$ при $\gamma_e^3 = 1/4\pi$, а при больших γ_e — L_e становится отрицательным.

Существует много работ, посвященных расчету τ_{ee} в виде (3.9), но с модифицированным кулоновским логарифмом, который не теряет смысла при $\gamma_e \geq 1$. В [48] был также предложен способ расчета эффективного L_e . Все эти оценки позволяют считать, что в условиях [8–11] $\tau_{ee} = 10^{-11} - 10^{-10}$ сек. В [35] в классической постановке задачи для условий [8–11] решались методом молекулярной динамики уравнения движения для частиц с кулоновским взаимодействием. Расчеты показывают, что τ_{ee} соответствуют выше приведенным значениям. После установления температуры T_e начинает идти процесс установления термического равновесия между электронами и ионами и одновременно с ними процесс рекомбинации. Для оценки времени установления термического равновесия воспользуемся формулой для τ_{ei} в случае слабонеидеальной плазмы [47]:

$$\tau_{ei} = \frac{(T_e)^{3/2} M_i}{8n_i z^2 e^4 L_e (2\pi m_e)^{1/2}}, \quad (3.11)$$

где n_i , M_i , z — концентрация, масса и заряд ионов соответственно.

Оценка τ_{ei} проведенная в [48] для ультрахолодной неидеальной плазмы [8–11] дает значение несколько микросекунд. Это означает, что за $t \sim 10^{-6}$ сек в ридберговской ультрахолодной плазме температура ионов становится равной температуре электронов. Эти оценки находятся в согласии с результатами [34]. В

[34] рассчитывалось методом молекулярной динамики изменение средней кинетической энергии ионов, взаимодействующих при помощи потенциала типа потенциала Юкавы. При этом электроны играют роль экранирующего однородного фона.

Процессы рекомбинации влияют на процесс установления температуры и наоборот. В [48] удалось показать, что процесс рекомбинации в условиях [8–11] идет значительно медленнее ($\sim 10^{-4}$ с), чем процесс установления температуры. Существенного повышения температуры электронов за счет рекомбинации не происходит. За $\sim 10^{-6}$ секунд плазма становится термически равновесной и, в то же время, отсутствует равновесная заселенность электронов по энергетическим уровням. Надо добавить, что в эксперименте [8–10] также получается замедление рекомбинации, а разлет плазмы начинается при $t > 10^{-5}$ с.

В [36] существует точка зрения, что рекомбинация очень существенна и приводит к сильному разогреву электронов, а значит и плазмы. В качестве доказательства использовались результаты работы [35]. В [48] было установлено, что расчет рекомбинации при $T \sim 1$ К в предположении квазинепрерывного, а не дискретного распределения связанных состояний становится неверным при номере ридберговского уровня $k \leq 50$. Это связано с тем, что для $k \leq 50$ $\Delta E_k/T > 1$. Вероятность перехода электрона на более низкий уровень в этом диапазоне за счет столкновений определяется $\exp(-\Delta E_k/T)$ и становится очень малой. Процесс рекомбинации резко замедляется. В связи с этим результаты, полученные в [35] и рассчитанные до $k \geq 43$ и при $t \leq 10^{-7}$ сек (граничное время определено для условий [8–10]) нельзя экстраполировать до $t \sim 10^{-6}$ сек.

Учитывая все выше сказанное, можно предположить, что после установления термического равновесия в ультрахолодной плазме при наличии незначительного количества рекомбинировавших электронов (т. е. рекомбинация протекает медленно) можно рассчитывать методами равновесной термодинамики термодинамические и корреляционные функции такой системы.

Другими словами, температура электронов и ионов для условий [8–10] выравнивается за времена порядка 1 мкс, а разлёт системы начинается через времена порядка 100 мкс — на этом интервале времен в системе устанавливается термическое равновесие. При этом отсутствует химическое равновесие, т. е. нет равновесной заселенности ридберговских состояний, поскольку время рекомбинации в эксперименте превышает 100 мкс.

В диссертации разработана псевдопотенциальная модель, где электрон–ионный псевдопотенциал рассчитывается с учетом только тех энергетических уровней, которые существуют в нерекombинировавшей плазме. Например, в условиях [8–10] существует только непрерывный спектр, а в условиях [11] — непрерывный спектр и дискретный от $k \geq 36$ или $k \geq 39$. Также рассмотрен случай, соответствующий $k \geq 10$.

Электрон–ионный псевдопотенциал существенно отличается от закона Кулона. Причем, при учете только непрерывного спектра псевдопотенциал переходит в закон Кулона на $10^6 a_0$ (a_0 — радиус Бора) [31]. Учет уровней дискретного спектра с 36 уровня существенно понижает ион–электронный псевдопотенциал, а переход в кулоновский происходит на тысячах a_0 . Стоит отметить, что в данной модели не учитывается взаимодействие с нейтральными атомами ввиду малой плотности системы. А электрон–ионный псевдопотенциал рассчитывается фактически для атома водорода.

Электрон–электронный и ион–ионный псевдопотенциалы совпадают с законом Кулона. В случае электрон–электронного взаимодействия отличие возникает на очень малых расстояниях и псевдопотенциал описывается аппроксимационным выражением, полученным в работах [14]. В случае ион–ионного и ион–электронного псевдопотенциала необходимо учесть размер иона.

При квазиклассическом подходе квантовая статистическая сумма приводится к выражению, по форме являющемуся классическим. Поэтому для определения соответствующих термодинамических величин можно применить

все методы, разработанные в статистической термодинамике классических систем, как аналитические, так и численные. Для расчета термодинамических свойств и корреляционных функций ридберговской ультрахолодной плазмы был использован метод Монте–Карло для многокомпонентной плазмы в каноническом ансамбле. Определение различных термодинамических величин при этом сводится к вычислению средних значений от известных функций координат. Границы применимости псевдопотенциальной модели подробно рассмотрены в [13]. В нашем случае модель справедлива в области значений γ от нуля (где было получено хорошее согласие результатов с приближением для идеальной дебаевской плазмы) до нескольких десятков (где начинается вырождение плазмы).

Благодаря низкой плотности рассматриваемой системы мы можем ограничиться приближением парного взаимодействия слэтеровской суммы (не учитывать трех– и более частичные связанные состояния).

3.3 Квазиклассический расчет псевдопотенциалов взаимодействия

3.3.1 Электрон–электрон и ион–ион

Слэтеровская сумма для взаимодействия двух электронов записывается в виде [13]:

$$S_{ee}(r, T) = 16\pi^{3/2} \lambda_{ee}^3 \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(r, \sigma_1, \sigma_2)|^2 \exp(-\beta E_{\alpha}) \equiv \exp(-\beta \Phi_{ee}(r, T)) \quad (3.12)$$

Волновые функции, входящие в выражение (3.12) зависят от спинов электронов σ_1 , σ_2 и должны быть антисимметричны. Причем (3.12) можно записать как сумму вкладов от волновых функций с симметричными и несимметричными частями:

$$S_{ee}(r, T) = \frac{1}{4} S_{ee}^c(r, T) + \frac{3}{4} S_{ee}^a(r, T) \equiv \exp(-\beta\Phi_{ee}(r, T)) \quad (3.13)$$

Численные расчеты $\Phi_{ee}(r, T)$ были проведены в [15] в широком диапазоне температур $10^2 \text{ К} - 10^5 \text{ К}$ и там же было предложено следующее аппроксимационное выражение для Φ_{ee} и для $\Phi_{ee}(0, T)$:

$$\Phi_{ee}(r, T) = \frac{2}{r} (1 - \exp(-8.35 \cdot 10^{-4} \cdot r \cdot T^{0.625}))$$

$$\Phi_{ee}(0, T) = 16.7 \cdot 10^{-4} T^{0.625}, \quad (3.14)$$

где r выражено в радиусах Бора, T в кельвинах, а Φ_{ee} — в ридбергах ($Ry = 13.6 \text{ эВ}$).

На больших расстояниях (3.14) совпадает с кулоновской зависимостью.

При $\frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}} > 1$ выражение (3.2) при $r = 0$ можно записать [49]:

$$S_{ee}(0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}}) \approx (\frac{4\pi}{3})^{1/2} (\frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}})^{4/3} (\frac{\pi}{2})^{1/3} \exp(-3(\pi \frac{\beta e^2}{2\lambda_{ee}})^{2/3}) \quad (3.15)$$

Из (2.15) следует, что при $\frac{\beta e^2}{\lambda_{ee}} > 1$ можно пользоваться аппроксимацией (3.14) до $T = 0.1 \text{ К}$.

На рис.13 приведены электрон–электронные псевдопотенциалы при $T = 0.1 \text{ К}$, 0.5 К , 1 К и для сравнения кулоновская зависимость.

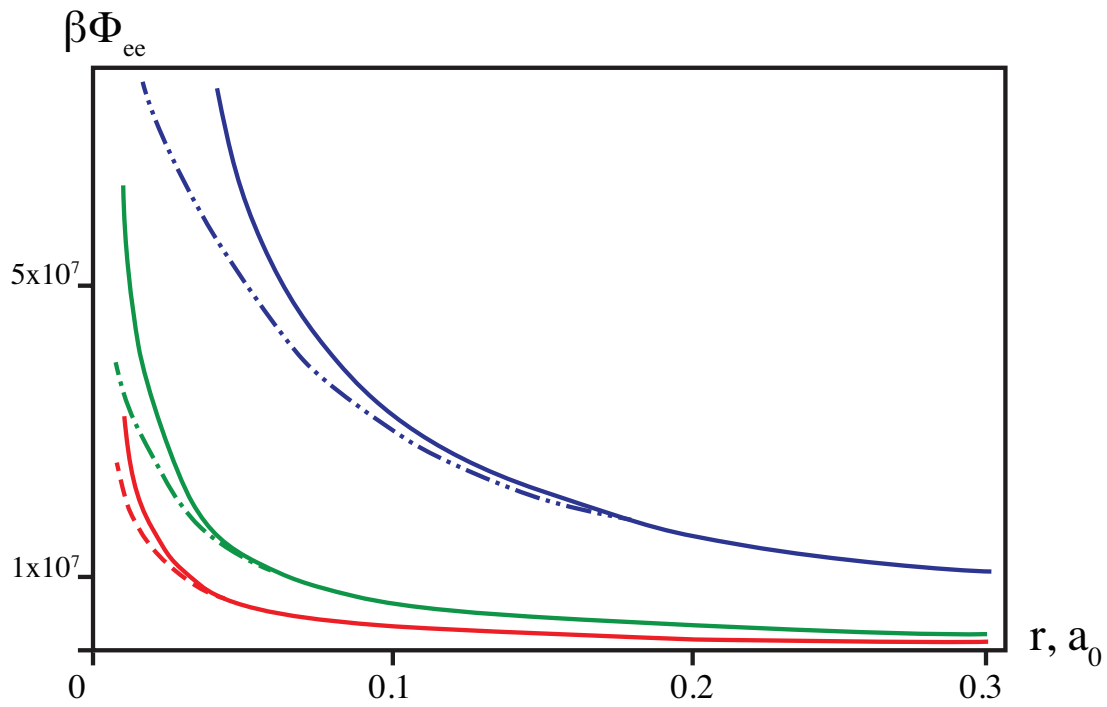


Рис. 13. Электрон–электронные псевдопотенциалы при температурах: **пунктир** — $T = 1$ К, **точка–пунктир** — $T = 0.5$ К, **две точки–пунктир** — $T = 0.1$ К в сравнении с кулоновскими потенциалами (сплошные линии).

Ион–ионные псевдопотенциалы согласно [13] совпадают с законом Кулона. Необходимо только учесть конечность размеров иона (например, кристаллографический радиус).

3.3.2 Электрон–ион

В случае взаимодействия электрона с ионом псевдопотенциал определяется следующим образом:

$$\exp(-\beta\Phi_{ei}(r, T)) = S_{ei} = 8\pi^{3/2}\lambda_{ei}^3 \sum_{E_\alpha=E_0}^{\infty} |\Psi_\alpha(r)|^2 \exp(-\beta E_\alpha) \quad (3.16)$$

где S_{ei} — двухчастичная сумма Слэтера, $E_\alpha(r)$ и $\Psi_\alpha(r)$ — энергия и волновая функция электрона в поле иона в состоянии α ,

$$\lambda_{ei} = \frac{\lambda_e}{\sqrt{2}}.$$

Суммирование проводится по всем возможным состояниям E_α . Этот псевдопотенциал имеет конечное значение при $r = 0$, а на больших расстояниях совпадает с законом Кулона.

Для таких систем как ридберговская плазма, на термодинамические свойства сильно влияют связанные состояния. Удобно выделять слагаемые слетеровской суммы для дискретного и непрерывного спектров.

Для плазмы, когда отсутствуют связанные состояния до $n = n_0$, $S_{ei}(r, T)$ можно записать в следующем виде [13]:

$$S_{ei}(r, T) = S_d + S_c, \quad (3.17)$$

где

$$S_d = 8\pi^{3/2} \lambda_{ei}^3 \sum_{E_\alpha=E_0}^{E'} |\psi_\alpha(r)|^2 \exp(-\beta E_\alpha) \quad (3.18)$$

вклад части дискретного спектра от E_0 до E' , который можно вычислить по известным $\Psi_\alpha(r)$ для атома водорода, а вклад остальной части спектра:

$$S_c(r, T) = e^{-\frac{\beta e^2}{r}}, \text{ при } \frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} \geq \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}} \quad (3.19)$$

$$S_c(r, T) = (1 - y(\sqrt{\beta E' + \frac{\beta e^2}{r}})) e^{-\frac{\beta e^2}{r}} + 2\pi^{-1/2} (\beta E' + \frac{\beta e^2}{r})^{1/2},$$

$$\text{при } \frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} < \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}, \text{ где } y(z) = 2\pi^{-1/2} \int_0^z e^{-t^2} dt$$

$S_c(r, T)$ получена в квазиклассическом приближении для связанных состояний при $E_\alpha > E'$ и состояний непрерывного спектра.

Выражения (2.18) и (2.19) в случае $\left| \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}} \right| > 1$ при $r = 0$ имеют вид:

$$S_d(0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}) \approx \pi^{1/2} (\frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}})^3 n_0^{-3} \exp(\frac{\beta e^2}{n_0^3}) \quad (3.20)$$

$$S_c(0, \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}) \approx 2\pi^{1/2} \frac{\beta e^2}{\lambda_{ei}}$$

Для иона Хе нужно также учесть конечность его размера (кристаллографический радиус $\approx 2\text{\AA}$) при определении $\Phi_{ei}(r, T)$.

В псевдопотенциальной модели, которая рассматривается в настоящей работе, электрон–ионный псевдопотенциал рассчитывается по формуле (3.16) с учетом только тех энергетических уровней, которые существуют в нерекombинировавшей плазме. Например, в условиях [8–10] существует только непрерывный спектр, а в условиях [11] — непрерывный спектр и дискретный от $k \geq 36$ или $k \geq 39$. Мы также рассматриваем случай, соответствующий $k \geq 10$.

Электрон–ионный псевдопотенциал существенно отличается от закона Кулона [13]. Причем, при учете только непрерывного спектра псевдопотенциал переходит в закон Кулона на $10^6 a_0$ (a_0 — радиус Бора) [50, 31]. Учет уровней дискретного спектра с 36 уровня существенно понижает ион–электронный псевдопотенциал, а переход в закон Кулона происходит на тысячах a_0 .

На рис. 14 приведены электрон–ионные потенциалы при учете только непрерывного спектра при $T=0.1$ К, 0.5 К, 1 К, а также потенциал Кулона.

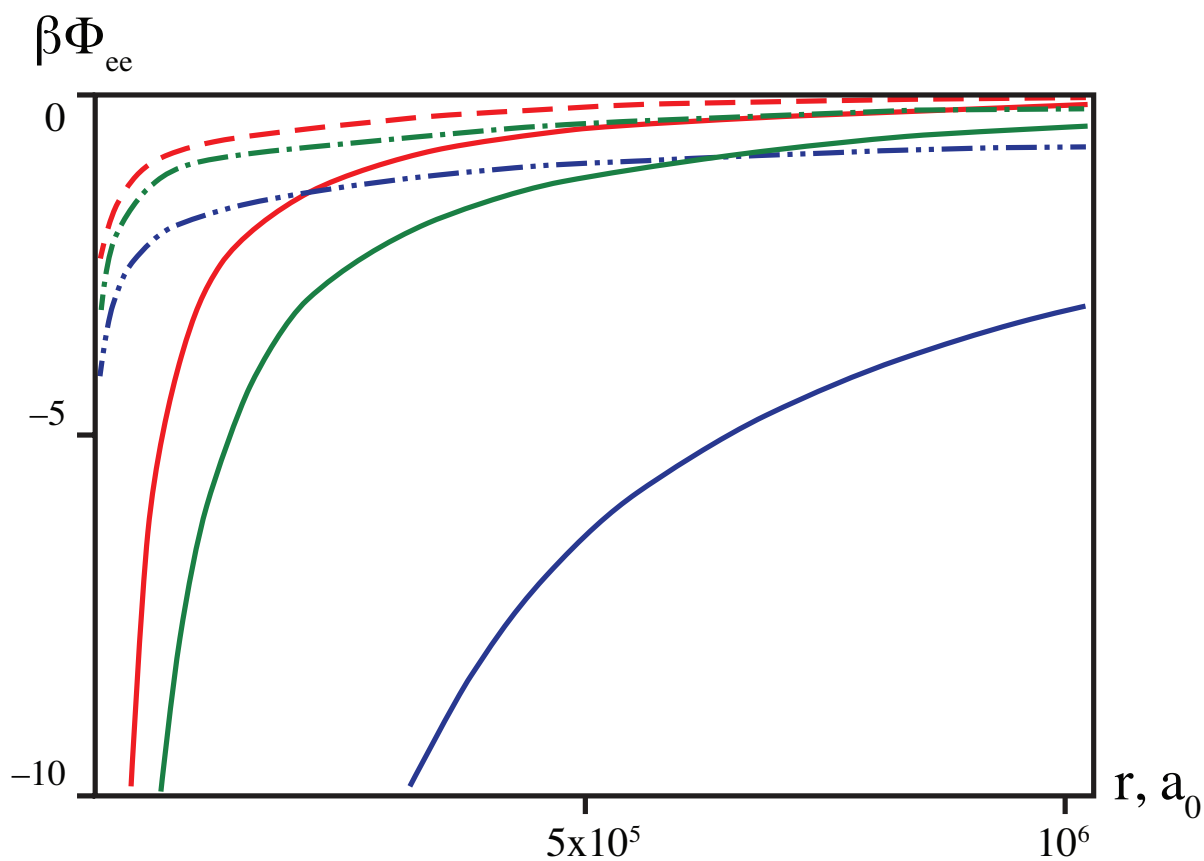


Рис. 14. Ион–электронные псевдопотенциалы при различных температурах: **пунктир** — $T = 1$ K, **точка–пунктир** — $T = 0.5$ K, **две точки–пунктир** — $T = 0.1$ K в сравнении с кулоновскими потенциалами (сплошные линии).

На рис. 15 показано отличие псевдопотенциала при учете уровней энергии начиная с 36 и 10 уровней при разных температурах от потенциала Кулона.

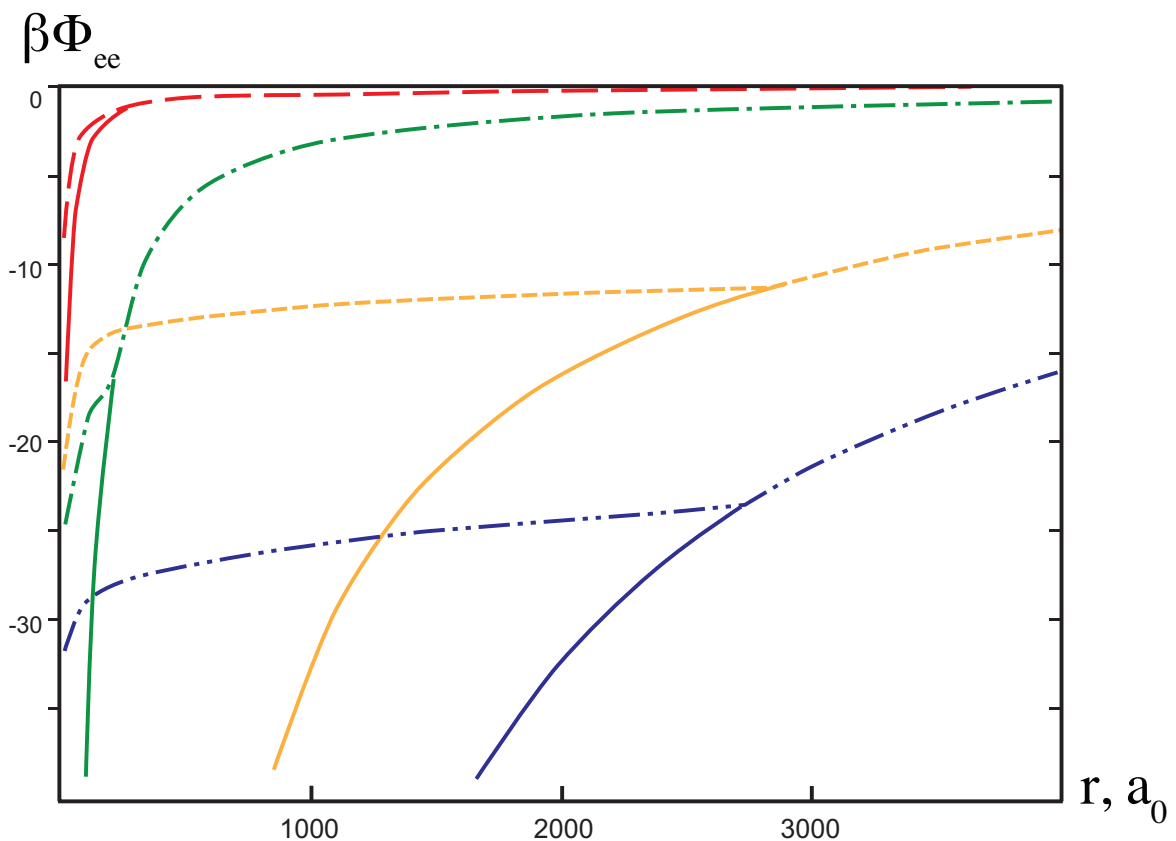


Рис. 15. Ион–электронные псевдопотенциалы, рассчитанные по ϕ -лам (2.19), (2.20), начиная с **10 уровня** возбуждения: **длинный пунктир** — температура 1000 К, **штрих–пунктир** — температура 100 К; начиная с **36 уровня** возбуждения: **короткий пунктир** — температура 10 К, **2 точки–пунктир** — температура 5 К в сравнении с кулоновскими потенциалами — сплошные линии при соответствующих температурах.

3.4 «Точный» расчет электрон–протонного псевдопотенциала

В данном параграфе приводится разработанный численный расчет электрон–протонного взаимодействия, использующий двухчастичную матрицу плотности взаимодействия. Он «точный» в том смысле, что использует в качестве исходных данных известные волновые водородные функции и поэтому его точность ограничена лишь точностью машинного счета. Этот способ позволит нам оценить погрешность квазиклассического расчета

псевдопотенциала, описанного выше. Результаты расчетов двухчастичной матрицы плотности взаимодействия электрона с протоном известны в литературе (например [14, 51, 52]), в данном параграфе проделан расчет, аналогичный [14], но впервые в области низких температур и при отсутствии некоторых водородных уровней в системе (что предполагается в экспериментах, которые мы моделируем). В этих условиях показана возможность оптимизации алгоритма расчета.

Двухчастичная матрица плотности определяется по формуле

$$\rho_{n_1 n_2} = \psi_{n_1} \exp(-\beta \hat{H}) \psi_{n_2}^* \quad (3.21)$$

где n_1, n_2 — состояния системы, \hat{H} — гамильтониан системы, $\beta = 1/(kT)$, k — постоянная Больцмана.

Сумма диагональных элементов этой матрицы — слэтеровская сумма:

$$S_2 = 8\pi^{3/2} \lambda^3 \sum_n |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n), \quad (3.22)$$

где ψ_n и E_n — волновые функции и уровни энергии системы в состоянии n , $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu kT}}$ — тепловая длина волны де Бройля, \hbar — постоянная Планка.

Для системы электрон–протон имеем

$$S_{ep} = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{\mu} \right)^{3/2} \sum_n |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n), \quad \text{где } \mu = \frac{m_e m_p}{m_p + m_e}, \quad (3.23)$$

m_e и m_p — масса электрона и протона соответственно.

Слэтеровскую сумму можно разложить на два слагаемых:

$$S_{ep}(r, T) = S_d + S_c, \quad (3.24)$$

где S_d — сумма состояний дискретного спектра, S_c — сумма состояний непрерывного спектра.

Поскольку волновые функции системы электрон–протон известны (см. [53]), то слэтеровскую сумму можно рассчитать точно, при этом имеем

$$S_d = 8\pi^{3/2} \lambda_{ep}^3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-\beta E_n - \rho)}{n^4} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(2l+1)(n+l+1)! \rho^{2l}}{\{(n+l)!\}^3} \left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \right]^2, \quad (3.25)$$

где n — главное квантовое число, l — орбитальное квантовое число, $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ — обобщенный полином Лагерра, $\rho = 2r / (na_0)$, a_0 — борковский радиус, r — расстояние между электроном и протоном;

$$S_c = 8\pi^{3/2} \lambda_{ep}^3 (2\pi^2 r^2)^{-1} \int_0^{\infty} \exp(-\beta k^2 \hbar^2 / 2\mu) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [F_l(\alpha, kr)]^2 dk \quad (3.26)$$

где $\alpha = \mu e^2 / (\hbar^2 k)$, $F_l(\alpha, kr)$ — действительная часть кулоновской волновой функции непрерывного спектра, k — волновой вектор.

Более того, при $r = 0$ эта функция может быть вычислена аналитически. Это было сделано, например, в [13]:

При $\xi_{ep} > 1$ имеем

$$S_d(0, \xi_{ep}) \approx -\pi^{1/2} \xi_{ep}^3 e^{\beta I}, \quad S_c(0, \xi_{ep}) \approx -2\pi^{1/2} \xi,$$

где $\xi_{ep} = -\beta e^2 / \lambda_{ep}$, $I = Ry$.

Приближенный способ расчета слэтеровской суммы был предложен в [13]. Суть его заключается в том, что несколько первых слагаемых в слэтеровской сумме вычисляется точно по известным волновым функциям, а остальные слагаемые учитываются в квазиклассическом приближении:

$$S_d = 8\pi^{3/2} \lambda_{ei}^3 \sum_{E_\alpha=E_0}^{E'} \left| \psi_\alpha(r) \right|^2 \exp(-\beta E_\alpha)$$

есть вклад дискретной части спектра с энергией от E_0 до E' ,

$$S_c(r, T) = \exp\left(-\frac{\beta e^2}{r}\right) \text{ при } \frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} \geq \frac{|\beta e^2|}{\lambda_{ei}},$$

$$S_c(r, T) = \left[1 - y\left(\sqrt{\beta E' + \frac{\beta e^2}{r}}\right)\right] \exp\left(-\frac{\beta e^2}{r}\right) + 2\pi^{-1/2}(\beta E' + \frac{\beta e^2}{r}) \text{ при } \frac{\beta E' r}{\lambda_{ei}} < \frac{|\beta e^2|}{\lambda_{ei}}$$

где $y(z) = 2\pi^{-1/2} \int_0^z \exp(-t^2) dt$.

Значения двухчастичной матрицы плотности можно выразить в виде псевдопотенциала $\tilde{\Phi} = -\frac{\ln(S)}{\beta}$, который в случае взаимодействия электрона с протоном определяется выражением

$$\tilde{\Phi}_{ep}(r, \beta) = -\beta^{-1} \ln \left[\left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{\mu} \right)^{3/2} \left(\frac{S_d + S_c}{8\pi^{3/2}\lambda_{ep}^3} \right) \right] \quad (3.27)$$

и на больших расстояниях совпадает с законом Кулона.

Точный расчет проводился в [14] для диапазона температур от 10^2 до 10^7 К. Для электрон–протонного псевдопотенциала при низких температурах было получено аппроксимационное выражение

$$\tilde{\Phi}_{ep} = (T \times 10^{-5} / 1.5788)(2r + \frac{3}{2} \ln T - 20.606) - 1$$

(T в градусах К, r — в боровских радиусах, $\tilde{\Phi}_{ep}$ — в ридбергах).

В этом параграфе приведены точные численные расчеты псевдопотенциала аналогично [14], но для температур T от 3 до 100 К и описан упрощенный алгоритм такого расчета, справедливый в данной области температур.

3.4.1 Метод расчета волновых функций

Дискретные волновые функции

Значения обобщенного полинома Лагерра рассчитывались, согласно [54], по рекуррентным формулам:

$$\begin{aligned}L_0^\alpha(x) &= 1 \\L_1^\alpha(x) &= \alpha + 1 - x \\L_n^\alpha(x) &= L_n^{\alpha-1}(x) + L_{n-1}^\alpha(x) \\(n+1)L_{n+1}^\alpha(x) - (2n + \alpha + 1 - x)L_n^\alpha(x) + (n + \alpha)L_{n-1}^\alpha(x) &= 0, n = 1, 2, \dots\end{aligned}\tag{3.28}$$

Суммирование по n обрывалось на нескольких десятках, поскольку при температурах от 3 до 100 К вклад высоких уровней по сравнению с нижними состояниями несуществен. Как показано в [14], для низких температур в псевдопотенциал вносит вклад только первый уровень. Таким образом, в отличие от [14], не было необходимости аналитически продолжать сумму по n до бесконечности.

Непрерывные волновые функции

Действительные кулоновские волновые функции непрерывного спектра нулевого порядка были получены при помощи методов, описанных в [55]. Задача состояла в нахождении значений функции вида $F_l(\eta, \rho)$, где параметры $-\infty < \eta < +\infty$, $\rho > 0$, l — порядок функции (от 0 до бесконечности). В данном расчете $\eta > 0$ и по этим параметрам идет интегрирование, причем вклад функции в интеграл быстро убывает с ростом l , а также с увеличением параметров η и ρ .

Согласно [55], для области $\rho < 2\eta$ был использован метод *Риккати I*:

$$\begin{aligned}F_0(\eta, \rho) &= \frac{1}{2} e^{\varphi(t, \eta)} \\F_0'(\eta, \rho) &= (2\eta)^{-1} F_0 d\varphi / dt \\t &= \rho / 2\eta \\ \varphi(t, \eta) &= 2\eta g_0 + g_1 + (2\eta)^{-1} g_2 + (2\eta)^{-2} g_3 + \dots;\end{aligned}\tag{3.29}$$

для $\rho = 2\eta$ — формулы

$$\begin{aligned}
 F_0 &= 0.7063326373 \times \eta^{1/6} \left(1 - 0.04959570165 \times \eta^{-4/3} - 0.00888888889 \times \eta^{-2} - 0.002455199181 \times \eta^{-10/3} \right), \\
 F_0' &= 0.4086957323 \times \eta^{-1/6} \left(1 + 0.1728260369 \times \eta^{-2/3} + 0.00031746032 \times \eta^{-2} + 0.00358121485 \times \eta^{-8/3} \right), \\
 &\quad \left(+0.000311782468 \times \eta^{-4} + 0.0009073966427 \times \eta^{-14/3} + \dots \right)
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

для $\rho > 2\eta$ — метод Риккати II:

$$\begin{aligned}
 F_0 &= M \sin \varphi, G_0 = M \cos \varphi, \\
 F_0' &= -x^2 (BF_0 - AG_0), \\
 M &= \{1/(1-x)\}^{1/4} e^{\phi(\eta,x)}, x = 2\eta/\rho.
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

Таким образом вся область значений η и ρ была «покрыта» двумя методами Риккати I и II. Было обнаружено, что, несмотря на множество других методов расчета, предложенных в [55], и более подходящих для разных областей значений параметров η и ρ , методы, использованные в данной работе, дают достаточную для задачи разработки модели точность. Для наглядности в таблице 1 приведен массив значений $F[l][\eta][\rho]$. Выбраны точки, характерные (по мнению автора [55]) для различных областей значений η и ρ , и приведены результаты расчетов по формулам (3.9)–(3.11) и более точным методам для каждой точки из [55] для действительных волновых функций нулевого порядка.

Таблица 1. Сравнение результатов численного расчета значений волновых функций, полученных различными методами.

Элемент массива	Значение по (2.18)–(2.20)	Значение по [55]	Погрешность, %
F[0][50][120]	0.200245	0.20025	0.0025
F[0][50][80]	0.00120298	0.0012037	0.06
F[0][9][50]	0.935709	0.9357	0.00096
F[0][5][20]	−0.229377	−0.22935	0.01
F[0][3][10]	0.663431	0.6601	0.5
F[0][5][10]	0.917945	0.917945	0
F[0][10][10]	0.00162592	0.001626	0.005

Волновые функции высших порядков были получены по рекуррентным соотношениям из [56]:

$$\begin{aligned} (\eta^2 + L^2)^{1/2} F_{L-1}/L &= (\eta/L + L/\rho) F_L + F'_L \\ (\eta^2 + (L+1)^2)^{1/2} F_{L+1}/(L+1) + (\eta^2 + L^2)^{1/2} F_{L-1}/L &= (2L+1) [\eta/L(L+1) + 1/\rho] F_L. \end{aligned}$$

Согласно [55], данные соотношения могут применяться в большом диапазоне значений L без серьезного накопления ошибки.

3.4.2 Результаты расчётов

Были рассчитаны слэтеровские суммы для различных температур в диапазоне от 3 до 100 К и с учетом вкладов различного числа уровней дискретного спектра. От суммы волновых функций с весом численно вычислялся интеграл с конечной точностью.

Как уже было сказано, при низких температурах вклад основного состояния является преобладающим. Поэтому несколько первых уровней при расчётах исключались, чтобы обнаружить особенности поведения потенциала в области его выхода на кулоновский потенциал (рис. 16).

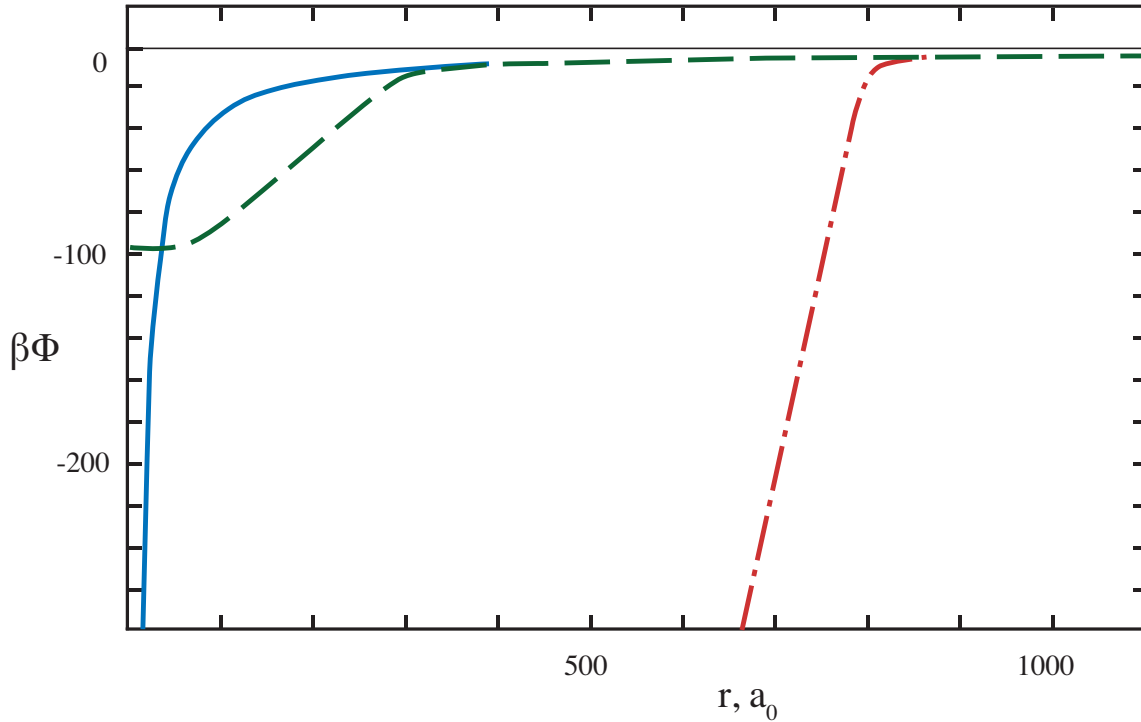


Рис. 16. $T = 100$ К; **пунктир** — псевдопотенциал, где вклад дискретного спектра учтен с 5-го уровня, **сплошная линия** — кулоновский потенциал, **штрих-пунктир** — псевдопотенциал, где вклад дискретного спектра учтен с 1-го уровня.

Правильность расчета в области низких температур была проверена на границе для $T = 100$ К путем сравнения с результатами из [14]. Получилось, что псевдопотенциал, рассчитанный по формулам (3.28)–(3.31), и рассчитанный в [14] совпадают с погрешностью, не превышающей 1%.

Сравнительный анализ результатов из [13, 31] и данных расчетов показал, что квазиклассический подход дает тем более точное значение двухчастичной матрицы плотности, чем ниже температура, что видно на рис. 17 и 18.

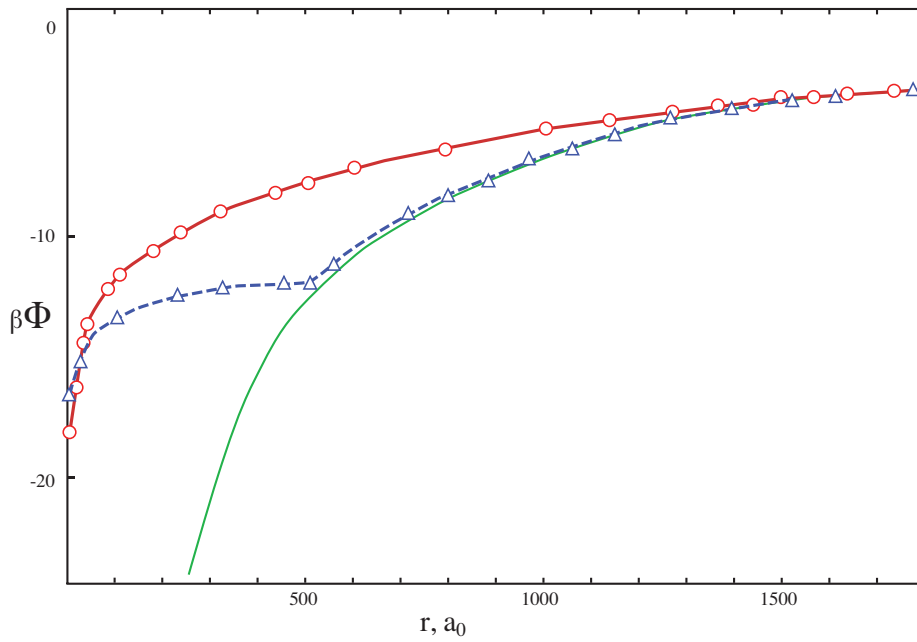


Рис. 17. $T = 50 \text{ K}$, вклад дискретного спектра учтен с 17 уровня: кружочки — псевдопотенциал, сплошная линия — кулоновский потенциал, треугольники — псевдопотенциал, рассчитанный в квазиклассическом приближении.

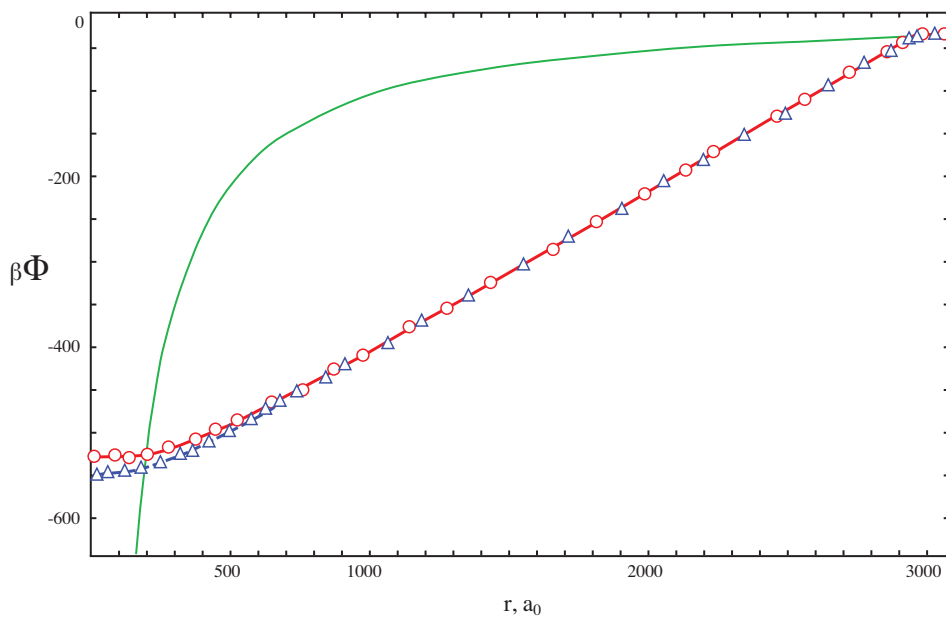


Рис. 18. $T = 3 \text{ K}$, вклад дискретного спектра учтен с 10 уровня: кружочки — псевдопотенциал, сплошная линия — кулоновский потенциал, треугольники — псевдопотенциал, рассчитанный в квазиклассическом приближении. В районе $500 a_0$ и далее он практически совпадает с точным расчетом.

Для сравнения на рис. 19 приведены графики псевдопотенциалов при различных температурах, вычисленные с учетом вклада уровней дискретного спектра, начиная с седьмого.

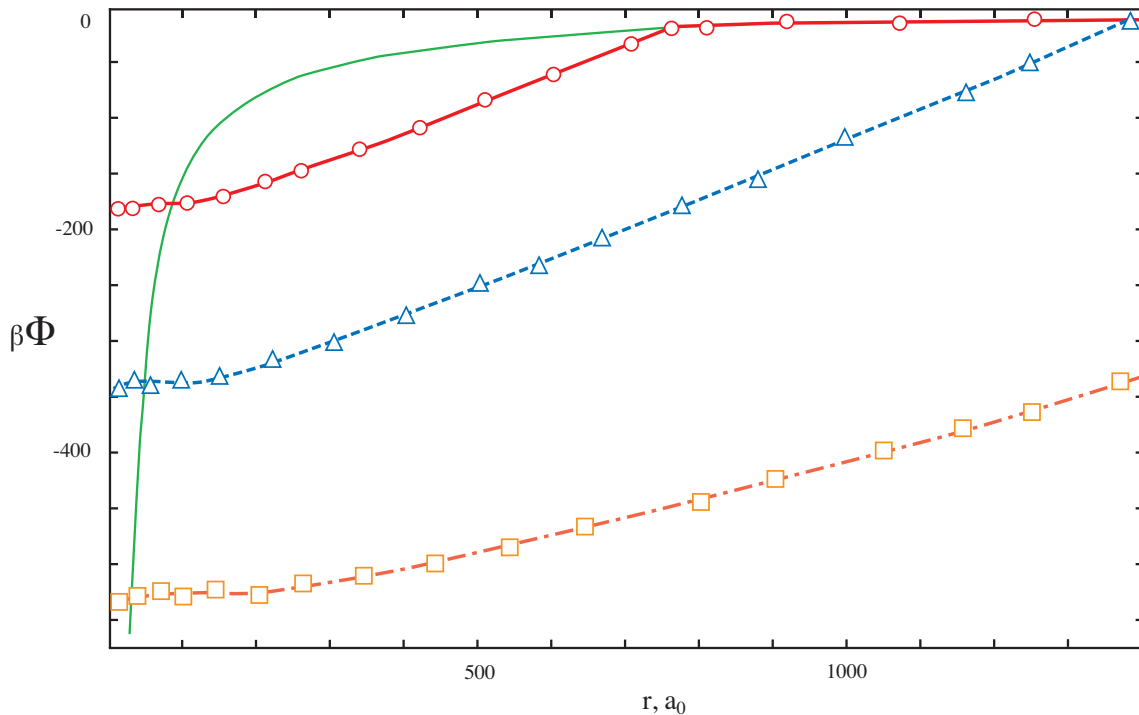


Рис. 19. Псевдопотенциалы с учетом вклада дискретного спектра с 7 уровня: кружочки — для 20 К, треугольники — для 10 К, квадратики — для 3 К, сплошная линия — кулоновский потенциал при 20 К.

Результаты расчета показывают, что точность квазиклассического подхода возрастает с понижением температуры. Причем для нахождения кулоновских волновых функций в данной задаче достаточно использовать методы *Риккати I* и *Риккати II* [55], существенно упрощая вычисления, ввиду отсутствия необходимости в избыточной точности.

3.5 Выводы

В этой главе сформулирована модифицированная модель ридберговской плазмы, в которой существуют свободные электроны, ионы и высоковозбужденные ридберговские атомы. Причем в ридберговских атомах реализованы только некоторые состояния дискретного спектра. Например, уровни дискретного спектра с 10-го и выше.

Выбор реализуемых уровней определяет взаимодействие в системе и как следствие — вид псевдопотенциала. В этой главе обоснована правомерность расчета термодинамики путем оценки времен релаксации различных степеней свободы системы. «Нереализованность» части дискретного спектра системы обусловлена в частности замедлением рекомбинации, полученной в экспериментах.

Заданы границы применимости модели и результатов расчетов — они обусловлены прежде всего отсутствием вырождения и применимостью парного приближения при расчете взаимодействия (среднее межчастичное расстояние много меньше дебройлевской длины волны и больше или сравнимо с размером ридберговского атома).

Также в этой главе обоснован и произведен точный численный расчет псевдопотенциалов электрон–ионного взаимодействия. Обнаружено, что точность приближенного квазиклассического расчета псевдопотенциала [13] тем лучше, чем ниже температура системы.

Глава 4. Термодинамические свойства ридберговской плазмы

В этой главе представлен метод и результаты расчета термодинамических и корреляционных свойств псевдопотенциальной модели ридберговской плазмы, разработанной в главе 2. Приведены результаты расчетов в широкой области параметров, в том числе в областях, близких к экспериментам [3–7] и [8–11].

4.1 Метод расчета термодинамических и корреляционных свойств

Для расчета термодинамических свойств и корреляционных функций ридберговской ультрахолодной плазмы был использован метод Монте–Карло для многокомпонентной плазмы в каноническом ансамбле, развитый в [12, 49].

Определение различных термодинамических величин при этом сводится к вычислению средних значений \bar{F} от известных функций координат (q).

Например, для энергии:

$$\bar{E} = Q^{-1}(N, V, T) \int \dots \int_V E_N(q) S_N(a, T) d^N q, \quad (4.1)$$

где $Q(N, V, T)$ — конфигурационный интеграл.

Метод Монте–Карло это численный метод, использующий цепи Маркова [12]. Он позволяет выбирать лишь основные, наиболее типичные слагаемые, определяющие значения интегральной суммы. Поэтому, иначе, он называется методом существенной выборки. Другой особенностью метода является использование периодических граничных условий. Все трехмерное пространство разбивается на равные ячейки объема V с N частицами в каждой. Если одна из частиц ячейки вследствие изменения своих координат выходит из этой ячейки,

то одновременно ее образ из соседней ячейки входит через противоположную грань и число частиц в ячейке сохраняется.

Расчеты проводились в NVT ансамбле для одинакового количества электронов и ионов с периодическими граничными условиями. Характерные длины цепей Маркова, использованные в расчетах, составляли несколько миллионов шагов. При числе частиц в ящике от 200 до нескольких тысяч. Взаимодействие в системе задавалось псевдопотенциалами, причем для взаимодействия одноименно заряженных частиц использовался кулоновский потенциал: ввиду больших значений средних расстояний поправки к кулоновскому потенциалу не вносили никакого вклада в результаты.

Погрешности результатов, полученных методом Монте–Карло [12], связаны с выбором числа частиц в ячейке и конечностью длины цепи Маркова. Для оценки погрешности выбора числа частиц были проделаны расчеты для различных N — 32, 64, 128, 256 и показана сходимость порядка или лучше $\sim N^{-1/2}$. Более того, несмотря на то, что в задаче используется дальнедействующий кулоновский потенциал и благодаря симметричности потенциалов одноименно и разноименно заряженных частиц, оказалось возможным избежать учета дальнедействия в системе и применения методов вроде суммирования Эвальда и т. п. На практике при числе частиц в ящике больше ~ 400 , независимо от выбранных температуры, плотности или псевдопотенциалов — не наблюдается расходимости результатов. Оценка статистической погрешности, связанной с конечностью длины цепи Маркова [12], позволила выбирать цепи Маркова необходимой длины. Кроме того, выбрасывается неравновесный участок цепи.

Проводились расчеты удельной внутренней энергии системы, электрон–электронных $g_{ee}(r)$, ион–ионных $g_{ii}(r)$ и электрон–ионных $g_{ei}(r)$ радиальных парных корреляционных функций, строились также трехмерные изображения полученных конфигураций.

4.2 Результаты расчетов

В работе [31] приведены результаты расчетов термодинамических и корреляционных функций при использовании электрон–ионного потенциала, рассчитанного с учетом только непрерывного спектра. В настоящей работе были проведены расчеты для температур $T = 1–100$ К и области концентраций $n_i = n_e = 10^5–10^{15}$ при учете в псевдопотенциале S_{ei} уровней энергии атома с 36 и 10 уровней. В случае $\gamma \ll 1$, так же, как и в [31] наблюдается хорошее согласие корреляционных функций с приближением Дебая–Хюккеля. При $\gamma \geq 1$ корреляционные функции указывают на образование ближнего порядка среди частиц, как одного, так и разных знаков. При росте γ этот порядок усиливается. Максимумы корреляционных функций растут, а минимумы обращаются в 0.

На рис. 20 приведены корреляционные функции $g_{ee}(r)$, $g_{ii}(r)$, $g_{ei}(r)$ для различных плотностей при температуре 0.1 К.

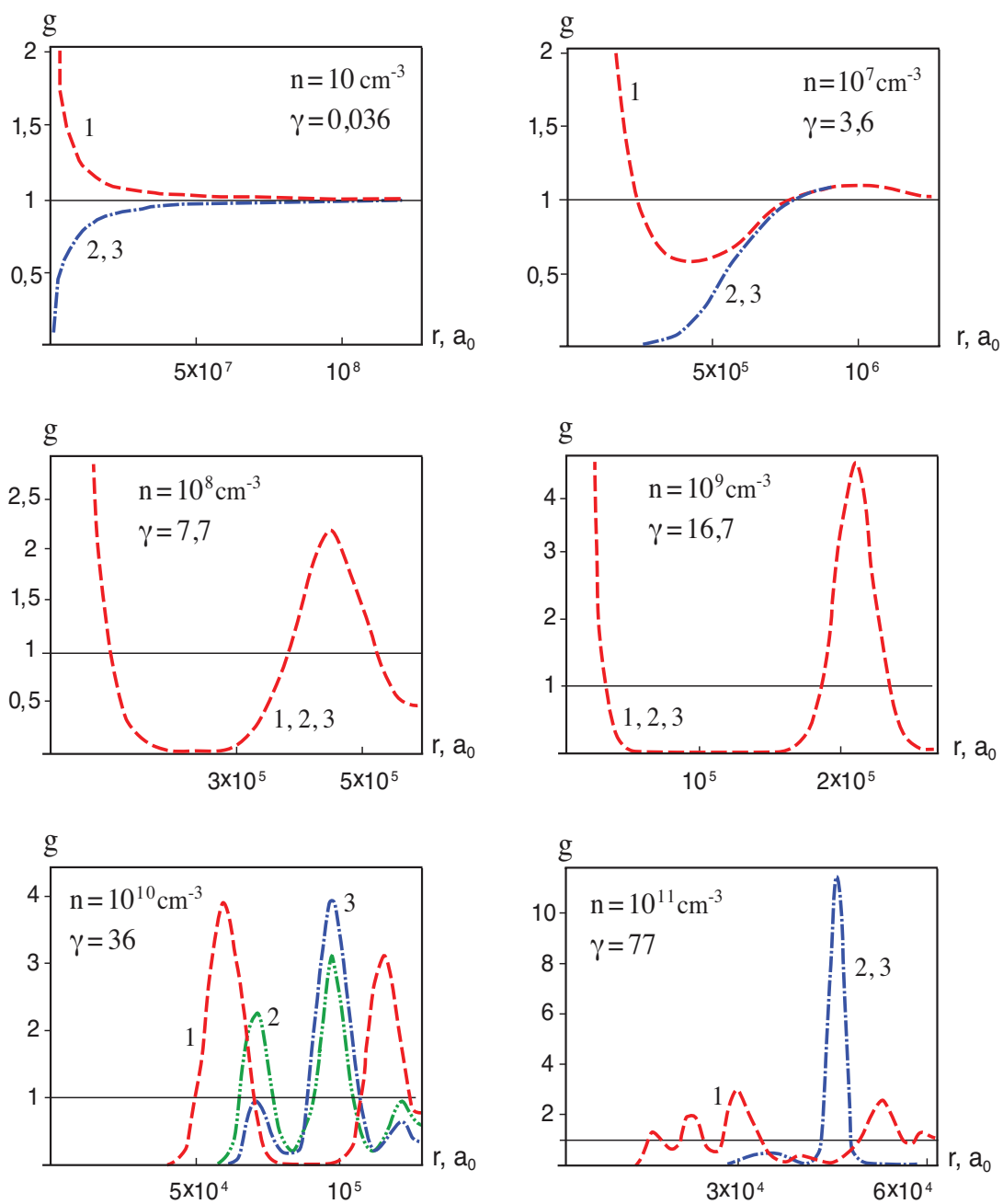


Рис. 20. Графики корреляционных функций при различных плотностях и температуре $T=0.1\text{K}$: 1 — $g_{ei}(r)$, 2 — $g_{ee}(r)$, 3 — $g_{ii}(r)$, в электрон-ионном псевдопотенциале учтен вклад только непрерывного спектра.

На рис. 21 приведена n - T диаграмма. На этой диаграмме видны области ближнего и дальнего порядка в зависимости от температуры и концентрации. При повышении T до 100 К область дальнего порядка смещается в сторону больших n .

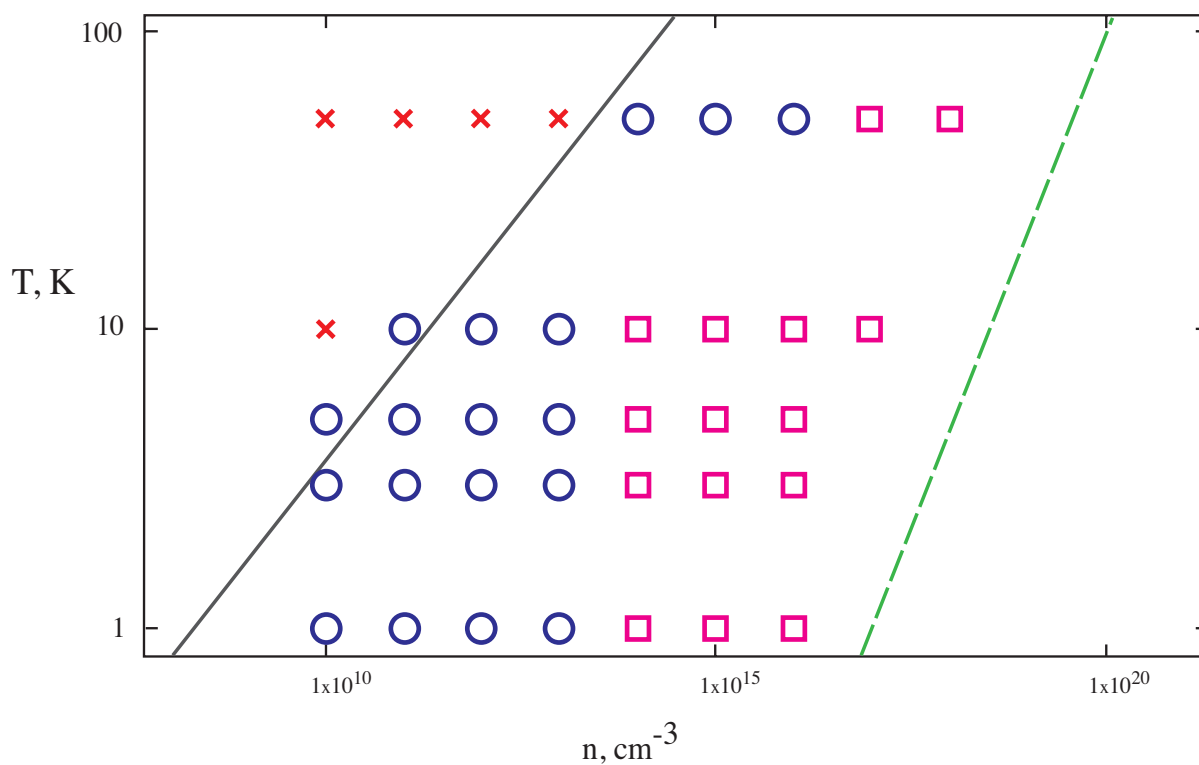


Рис.21. Диаграмма n - T с учетом дискретного спектра с 36 уровня. Крестики соответствуют газоподобному состоянию плазмы, кружки — «жидкому», квадраты — кристаллическому. **Сплошная** линия — $\gamma = 1$. **Пунктирная** линия — $n\lambda^3 = 1$.

На рис. 22 приведены корреляционные функции для случая, когда наблюдается дальний порядок в плазме при отрицательной энергии на одну частицу, что в свою очередь говорит о метастабильности такой структуры.

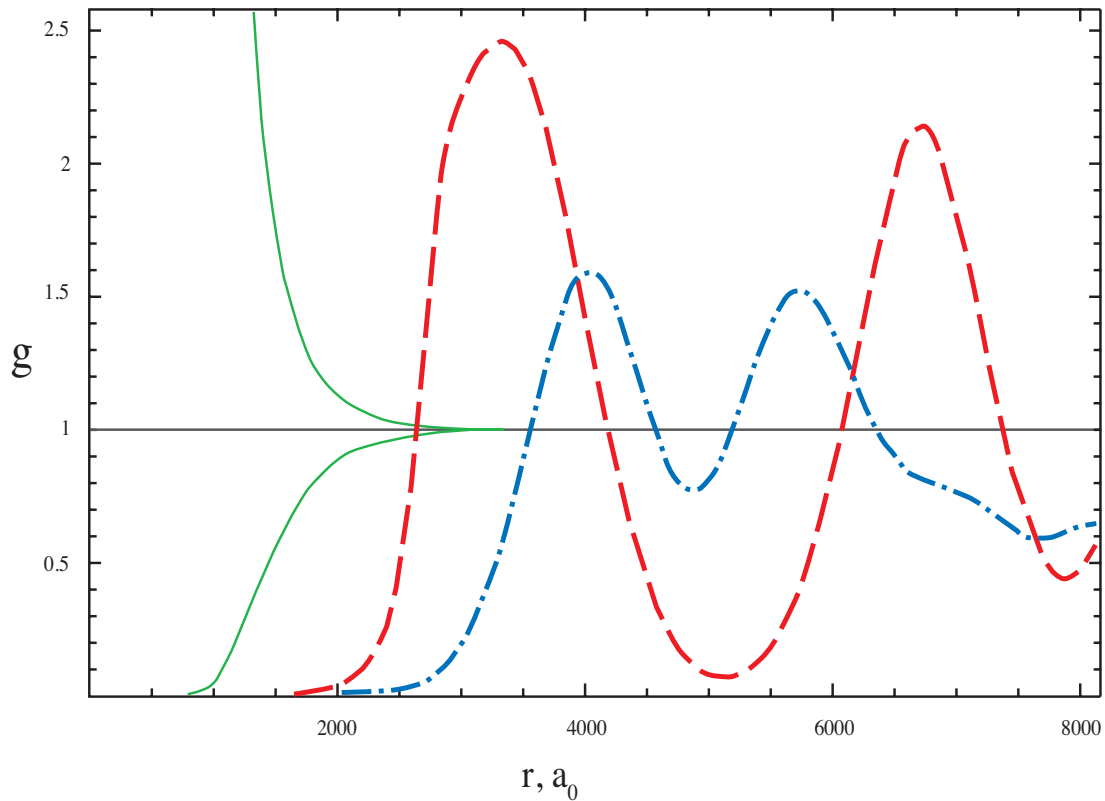


Рис.22. Корреляционные функции с учетом дискретного спектра с 36 уровня при $T = 10$ К, $n = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, параметр взаимодействия $\gamma = 7.75$, энергия на одну частицу $E = -11.5 \text{ кТ}$.

Пунктирная линия — электрон–ионная парная корреляционная функция, **штрих–пунктирная** — ион–ионная и электрон–электронная корреляционные функции (совпадают). **Сплошными** линиями показаны дебаевские корреляционные функции согласно формуле:

$$g(r) = 1 \pm \frac{\beta e^2}{r} e^{\frac{\beta e^2}{r} - 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2}}$$

На рис. 23 приведены корреляционные функции для случая, когда в плазме при отрицательной энергии на одну частицу наблюдается ближний порядок. Трехмерная визуализация этой точки показала, что система собирается в «капли» (кластеры из десятков электронов и ионов).

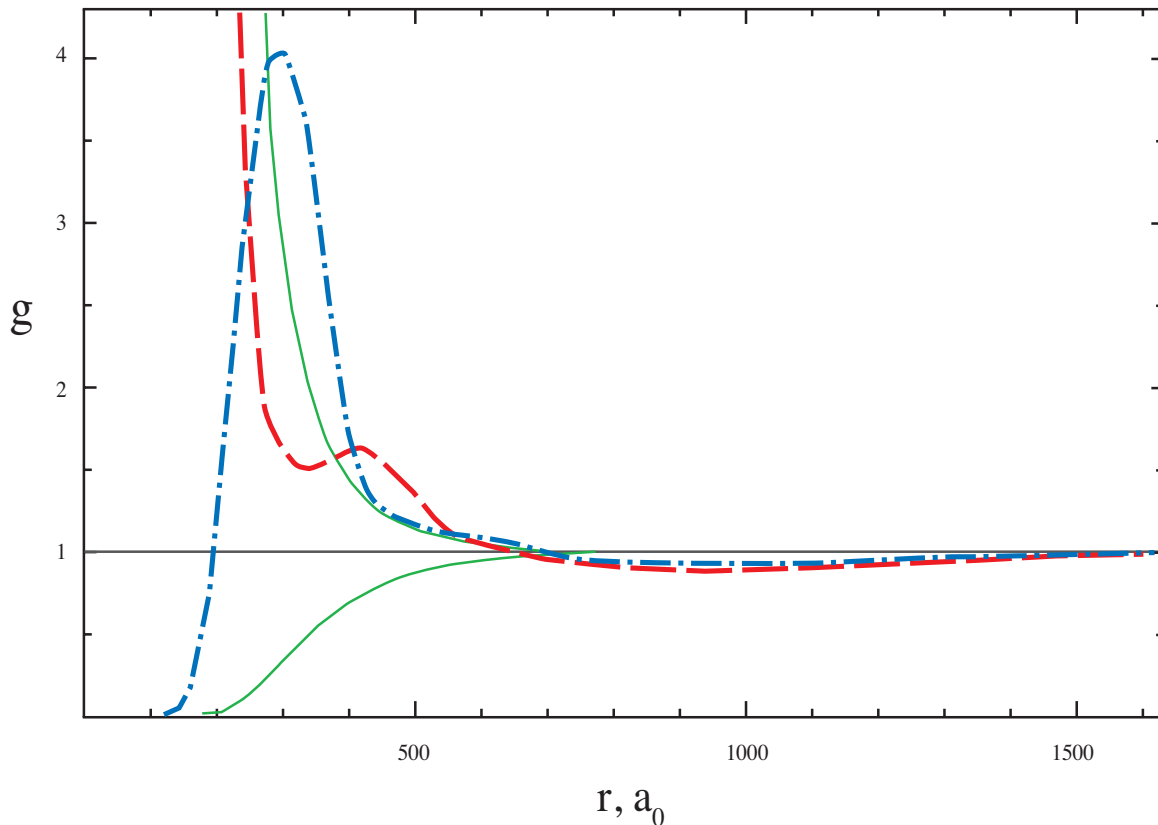


Рис.23. Корреляционные функции с учетом дискретного спектра с 10 уровня при температуре 100 K, концентрация 10^{16} см^{-3} , параметр взаимодействия $\gamma = 3.6$, энергия на одну частицу $E = -9.82 \text{ kT}$.

Пунктирная линия — электрон–ионная парная корреляционная функция. **Штрих–пунктирная** линия — ион–ионная и электрон–электронная корреляционные функции (совпадают). **Сплошными** линиями показаны дебаевские корреляционные функции согласно формуле:

$$g(r) = 1 \pm \frac{\beta e^2}{r} e^{\frac{\beta e^2}{r} - 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2}}$$

На рис. 24 приведены значения внутренней энергии E/NkT на одну частицу в зависимости от γ при учете уровней энергии атома с 36 уровня для $T = 1-10$ К. В отличие от [31], где E/NkT зависела только от γ , в данном случае имеет место расслоение результатов расчета по температуре.

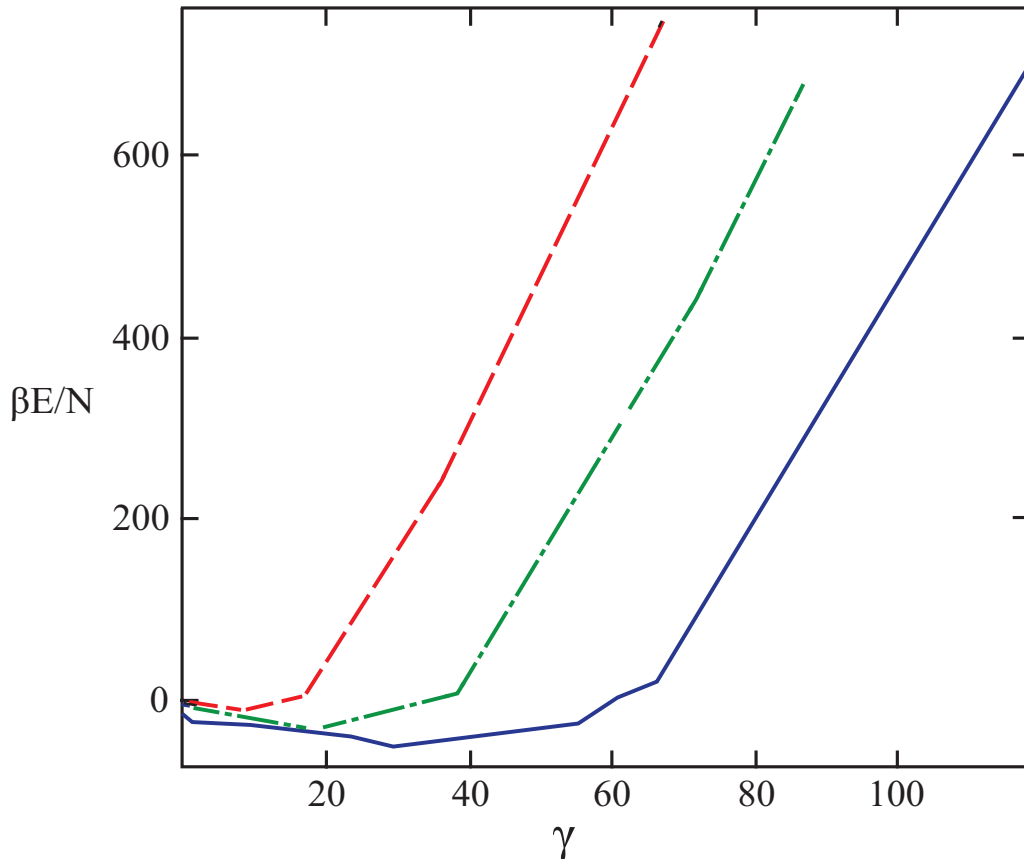


Рис. 24. График зависимости внутренней энергии на одну частицу E/NkT от параметра неидеальности γ с учетом дискретного спектра с 36 уровня. **Пунктирная** линия — температура $T = 10$ К, **штрих-пунктирная** линия — температура $T = 5$ К, **сплошная** линия — температура $T = 1$ К.

Как видно, зависимость E/NkT от γ для разных температур имеет подобный вид. Для каждой температуры при определенных γ есть область отрицательных значений. Причем, чем ниже температура, тем ниже эти значения. В пределе малых γ для всех температур наблюдается хорошее согласие с приближением Дебая–Хюккеля. Область положительных значений энергии для каждой

температуры хорошо аппроксимируется прямой линией одинакового наклона, причем переход E/NkT через ноль слабо зависит от температуры и соответствует $n = 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Также были проделаны расчеты для случая, когда в S_{ei} учитываются уровни, начиная с $k = 10$. Эти расчеты проделаны для $T = 100\text{--}1000 \text{ К}$. На рис. 25 приведена n – T диаграмма для этого случая. Здесь тоже обнаружены области образования ближнего и дальнего порядка.

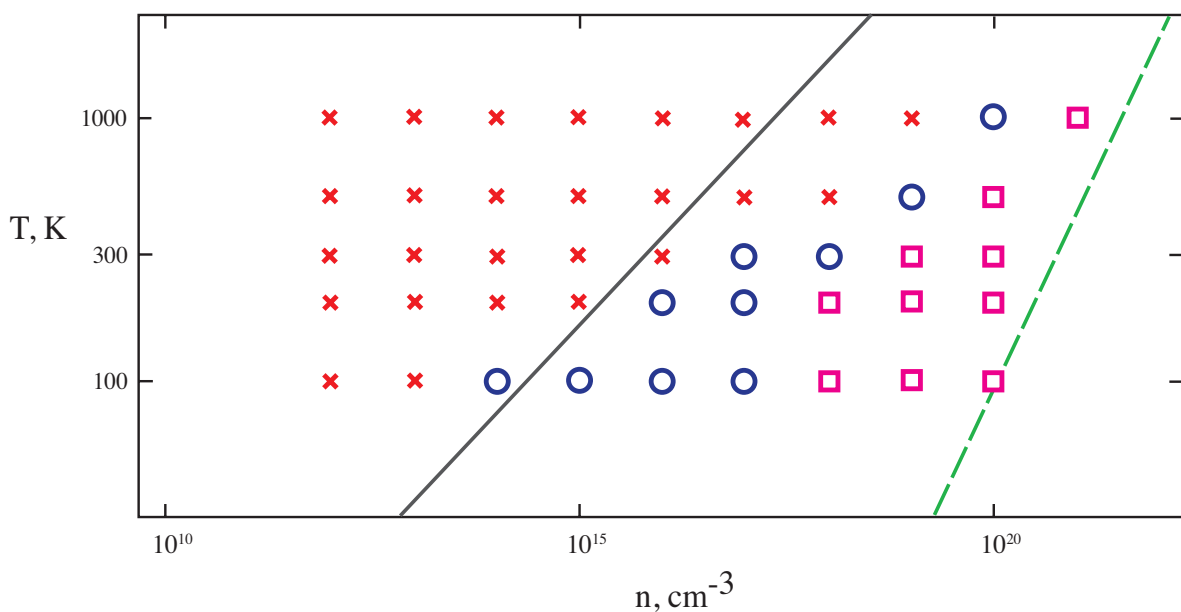


Рис. 25. n – T диаграмма 10-го уровня: **сплошная линия** — ($\gamma = 1$), **пунктирная** — вырождение ($n\gamma^3 = 1$). Крестики соответствуют газоподобному состоянию (Дебай), окружности — жидкости (ближний порядок), квадраты — решётке (дальному порядку).

На рис. 26 приведены значения E/NkT для 100 К, 300 К и 1000 К при учете уровней с $k = 10$. Значение $E/NkT = 0$ также слабо зависит от T и соответствует $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

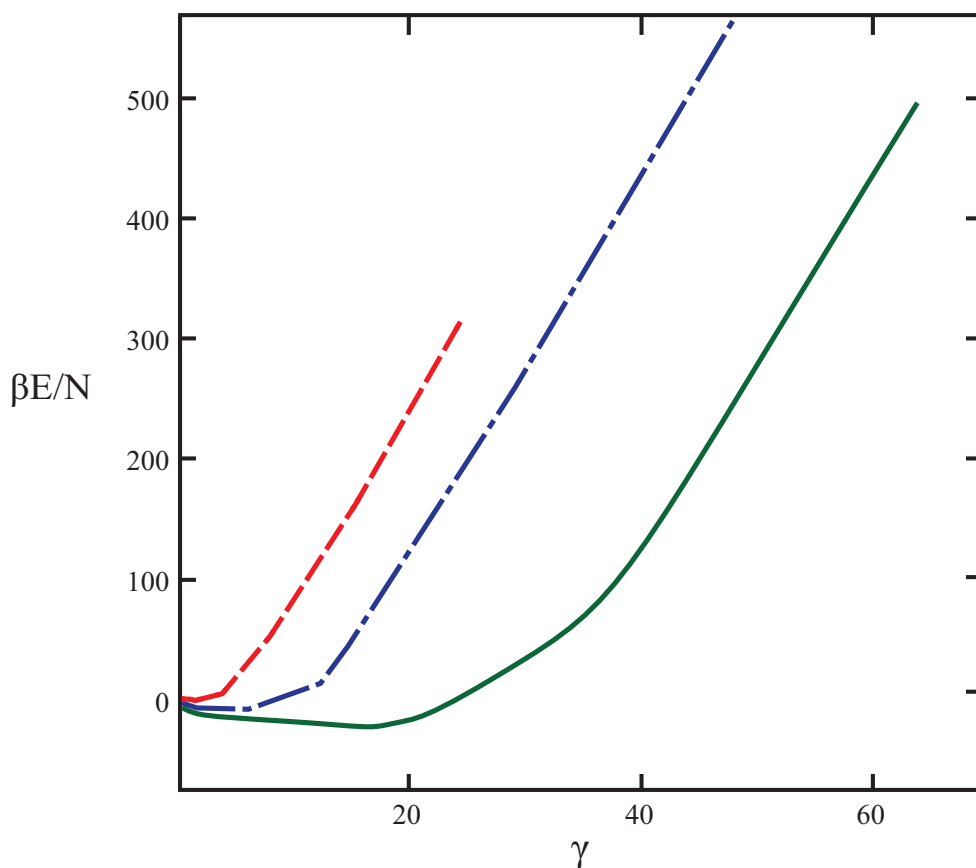


Рис. 26. График зависимости внутренней энергии на одну частицу E/NkT от параметра неидеальности γ с учетом дискретного спектра с 10 уровня. **Пунктирная** линия — температура $T = 1000$ К, **штрих-пунктирная** линия — температура $T = 300$ К, **сплошная** линия — температура $T = 100$ К.

Для сравнения E/NkT в зависимости от количества дискретных ридберговских уровней в псевдопотенциале S_{ei} на рис. 27 приведены значения E/NkT при $T = 100$ К при учете уровней с $k = 10$ и $k = 36$.

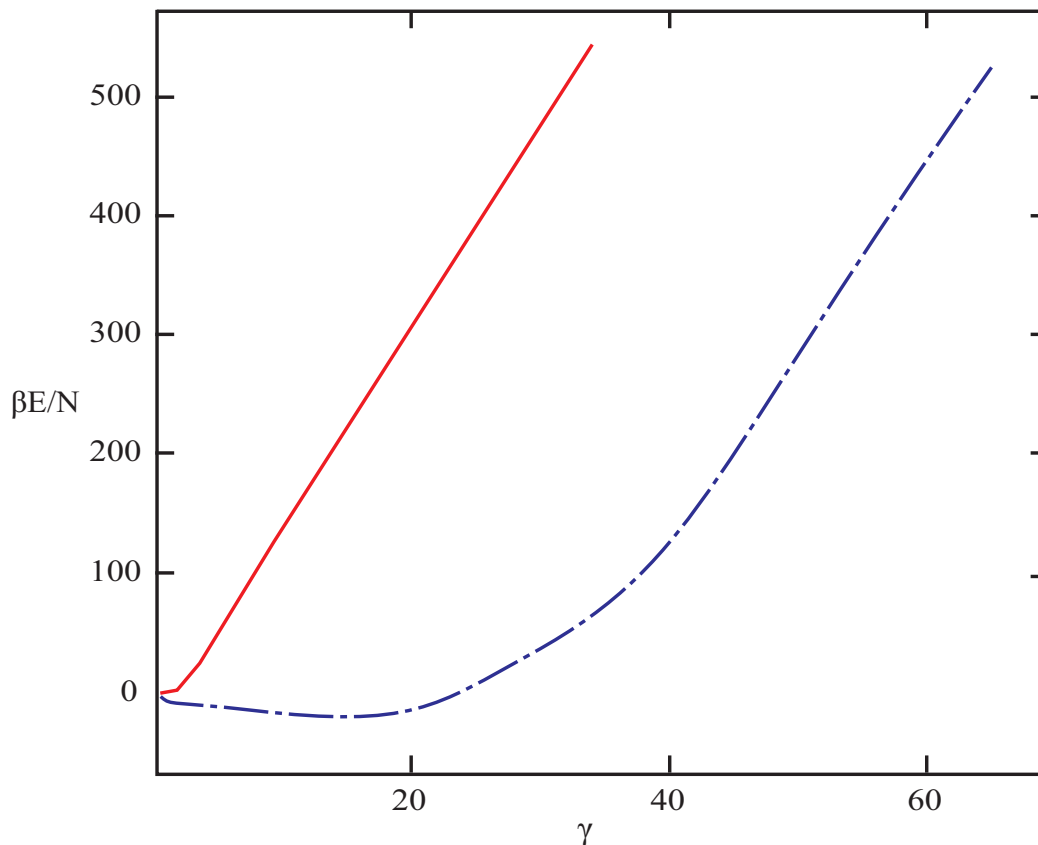


Рис. 27. Сравнительный график зависимости внутренней энергии на одну частицу E/NkT от параметра неидеальности γ с учетом дискретного спектра с 36 и 10 уровня для $T = 100$ К. Штрих-пунктирная линия — 10 уровень, сплошная линия — 36 уровень.

Можно считать с хорошей степенью точности, что прямые положительных значений имеют одинаковый наклон.

В связи с результатами, полученными в этом расчете и работе [31], хотелось бы отметить работу [41]. В ней было предположено, что в плазме образуется ионная решетка с размером равным среднему расстоянию. Вычисленная энергия на одну частицу так же, как и в данной работе в случае непрерывного спектра [31] положительна, и константа (аналог константы Маделунга) равна 11 ± 5 . Однако результаты приведенных в диссертации расчетов показывают, что предположение о существовании ионной решетки не совсем корректно, и скорее следует ожидать, что структуру образуют заряды

обоих знаков. А учет их вклада в расчет энергии может привести как к положительным, так и отрицательным значениям E .

4.3 Выводы

Динамика изменения парных корреляционных функций системы, представленная на рис. 20 качественно повторяется и для других псевдопотенциалов, других областей температур. При значениях параметра неидеальности $\gamma \ll 1$ корр. функции совпадают с идеальной плазмой в приближении Дебая–Хюкеля [14], что можно объяснить большим средним межчастичным расстоянием при низких плотностях. Частицы находятся друг от друга на расстояниях много больше размера полочки и взаимодействуют по классическому кулоновскому закону.

При увеличении параметра неидеальности γ до значений порядка единицы и больше единицы в корр. функциях начинает появляться максимум на расстоянии больше размера полочки, но меньше или порядка среднего расстояния. Образуется ближний порядок, который усиливается (т. е. максимум растет, а минимумы обращаются в ноль) с ростом параметра неидеальности до нескольких десятков. Это свидетельствует о формировании кластеров или «капель» электронов и ионов. Трехмерное визуальное моделирование результатов расчетов Монте–Карло подтверждает это. Такую структуру в данной работе мы называем «жидкоподобной». При дальнейшем росте γ достаточно резко формируются дополнительные максимумы в корр. функциях частиц одного и разных знаков, на больших расстояниях корр. функция обращается в ноль, т. е. дальний порядок. Трехмерное моделирование подтверждает формирование периодической структуры наподобие кристалла. В данной работе мы называем такую структуру «кристаллоподобной». Причем кристаллоподобная структура начинает формироваться еще в области отрицательных значений удельной внутренней энергии ($\gamma > 20$).

Такое изменение структуры универсально для разных псевдопотенциалов, что дает основание предполагать наличие фазовых переходов первого рода в модифицированной псевдопотенциальной модели и оценить область фазового перехода (см. рис. 21 и 26).

Глава 5. Базовая модель двухкомпонентной плазмы «кулон с полочкой»

В главах 3 и 4 диссертации решалась задача разработки из первых принципов модели ридберговской плазмы и определения ее термодинамики. Модели, близкой по своим свойствам к тем системам, которые наблюдались в экспериментах [3–7] и [8–11], а именно: неидеальная плазма при низких температурах, состоящая из свободных ионов, электронов и высоковозбужденных ридберговских атомов. Вид конкретного электрон–ионного псевдопотенциала (т. е. слэтеровской суммы в парном приближении) оказывается зависящим от температуры и от того, какие уровни возбуждения учитываются в ридберговских состояниях. При этом часто такой псевдопотенциал оказывается похожим на кулоновский, «обрезанный» на определенном расстоянии в виде полочки.

Получение каждого такого конкретного псевдопотенциала требует достаточно сложного расчета, и его вид, используемый непосредственно в расчетах Монте–Карло, зависит от множества параметров (температура, уровни возбуждения, способ интерполяции данных и т. п.). Что усложняет задачу исследования общих свойств такой системы. Таких, например, как фазовые переходы. Поэтому представляется уместным рассмотреть более универсальную модель двухкомпонентной плазмы, т. н. «кулон с полочкой». Во–первых, эта модель и ее свойства могут представлять самостоятельный интерес с точки зрения статистической физики плазмы, во–вторых это позволит лучше понять результаты численных экспериментов (глава 4) и особенности модели ридберговской плазмы (глава 3). В данной главе исследуется модель «кулон с полочкой»: рассчитываются термодинамические свойства и свойства фазового перехода типа «газ–жидкость».

Забегая вперед, стоит отметить, что «полочку» (то есть область обрезки кулоновского потенциала) можно ввести двумя способами: как размерную величину — максимальную глубину кулоновского электрон–ионного потенциала в абсолютных единицах энергии, а можно в виде безразмерной величины — в единицах температуры. Как станет ясно из дальнейшего изложения, для задачи исследования фазового перехода эти способы практически равноценны. Был выбран второй, так как он кажется более наглядным с точки зрения общего описания модели, а также соответствует принятому в главах 3 и 4 способу выражать псевдопотенциалы в единицах температуры. В заключении диссертации этот вопрос описан подробнее и сделана привязка результатов модели «кулон с полочкой» к результатам модифицированной псевдопотенциальной модели.

5.1 Актуальность и характерные особенности модели «кулон с полочкой»

В литературе для описания кулоновских систем частиц наиболее часто рассматриваются следующие физические модели:

1. Модель зарядов одного знака на компенсирующем фоне зарядов другого знака [57–59] (модель классической однокомпонентной плазмы, КОП). Эта модель обычно используется для описания термодинамических свойств жидких металлов и плотной вырожденной плазмы.
2. Электронейтральная модель разноименно заряженных кулоновских твердых сфер [60–62] (КТС), которая применяется для изучения свойств электролитов.

Эти модели используются, с одной стороны, для описания свойств реальных веществ. С другой стороны, они представляют самостоятельный интерес как

модели систем многих частиц, в которых возможны различные агрегатные (газообразное, жидкое, твердое) состояния.

Так например, в модели КОП был обнаружен фазовый переход типа «жидкость–кристалл», вызванный формированием упорядоченной структуры зарядов. Все равновесные свойства в этой модели зависят от единственного безразмерного параметра $\Gamma = \beta(Ze)^2(4\pi n/3)^{1/3}$, где $\beta = 1/k_B T$, n — плотность частиц, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, e — заряд электрона, Z — атомный номер [57–59]. Фазовый переход наблюдается в области $\Gamma \sim 250$ [59]. При этом образуется объемно–центрированная решетка. Фазовый переход типа «газ–жидкость» не обнаружен в этой модели.

В модели кулоновских твердых сфер обнаружены фазовые переходы типа «газ–жидкость» и «жидкость–кристалл». В отличие от КОП, свойства этой модели определяются двумя параметрами: безразмерной плотностью $\rho^* = n\sigma^3$, зависящей от размера сферы σ , и параметром взаимодействия, аналогичным Γ — $\chi = e^2/\sigma k_B T \sim 1/T^*$. Модель «кулон с полочкой» близка к модели твердых сфер в том смысле, что ее свойства также определяются двумя параметрами похожей природы и предполагается, что в модели «кулон с полочкой» тоже существуют фазовые переходы типа «газ–жидкость» и «жидкость–кристалл». Хотя в данной работе хорошо изучен только фазовый переход «газ–жидкость».

Эти две модели (КОП и КТС) отличаются друг от друга еще в одном немаловажном свойстве — теорема вириала выполняется в КОП, но не в КТС [63]:

$$P/nk_B T = 1 + E/3Nk_B T \quad (5.1)$$

где n — плотность частиц (см^{-3}), E , P , N — внутренняя энергия, давление и число частиц в системе.

Модель «кулон с полочкой» была впервые предложена в [64] и использована в [13, 64] в качестве базовой модели для расчета методом Монте–Карло термодинамических свойств двухкомпонентной невырожденной

низкотемпературной плазмы. Так же, как и в случае с модифицированной псевдопотенциальной моделью, разработанной в главе 2, формулировка этой модели основана на представлении статистической суммы невырожденной системы N_e электронов и N_i ионов в следующем виде:

$$Z(N, V, T) \sim \int_V d^{(N_e+N_i)} \vec{q} S_{N_e+N_i}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N_e+N_i}; T)$$

где $S_{N_e+N_i}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N_e+N_i}; T)$ — квантостатистическая плотность вероятности по состояниям системы $N_e + N_i$ частиц, которую называют слэтеровской суммой:

$$S_{N_e+N_i}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N_e+N_i}) \sim \sum_{n=0}^{\infty} |\Psi_n(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N_e+N_i})|^2 e^{-\beta E_n}$$

где \vec{q}_i — координата i -ой частицы, $\Psi_n(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N_e+N_i})$, E_n — волновые функции и собственные значения энергии системы $N_e + N_i$ частиц, $\beta = 1/k_B T$.

В первом приближении с учетом только парных квантовых эффектов слэтеровскую сумму можно представить в виде произведения парных слэтеровских сумм:

$$S_{N_e+N_i} = \prod_{i<j} S_2^{ee}(i, j) \prod_{k<l} S_2^{ii}(k, l) \prod_{m<n} S_2^{ei}(m, n)$$

Парные слэтеровские суммы электрон–ион и ион–ион различны для различных химических элементов. Если в качестве ионов рассматривать протоны, то парные слэтеровские суммы, в том числе и для взаимодействия электронов рассчитываются точно (см. главу 2). Однако у всех парных слэтеровских сумм имеются общие свойства — логарифм парной слэтеровской суммы на больших расстояниях совпадает с законом Кулона, а на малых конечен за счет парных квантовых эффектов и зависит от температуры. Совпадение парных слэтеровских сумм с законом Кулона позволяет ввести псевдопотенциалы.

Приближение, при котором квантово–статистическая плотность вероятности системы N частиц представляется в виде произведения парных, имеет широкие границы применимости (см. [13, 64]), а представление S_{ij} в виде псевдопотенциала $\beta\Phi_{ij} = -\ln S_{ij}$ позволяет использовать классический метод Монте–Карло для расчета термодинамических свойств.

Итак, определим модель «кулон с полочкой» [64] так, что псевдопотенциалы между зарядами одного и разных знаков задаются следующим образом:

$$\beta\Phi_{ee}(x) = \beta\Phi_{ii}(x) = x^{-1}$$

$$\beta\Phi_{ei}(x, \beta) = \begin{cases} -\varepsilon, & x \leq \varepsilon^{-1} \\ -x^{-1}, & x > \varepsilon^{-1} \end{cases}$$

где $x = r/\beta e^2$, а r — расстояние между частицами, $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура, k_B — постоянная Больцмана, e — заряд электрона, T — температура в градусах Кельвина.

Другими словами, в качестве потенциала взаимодействия между частицами одного знака используется кулоновский потенциал, а между разноименно заряженными частицами — кулоновский потенциал, «обрезанный» на расстоянии, определяемом ε (рис. 28).

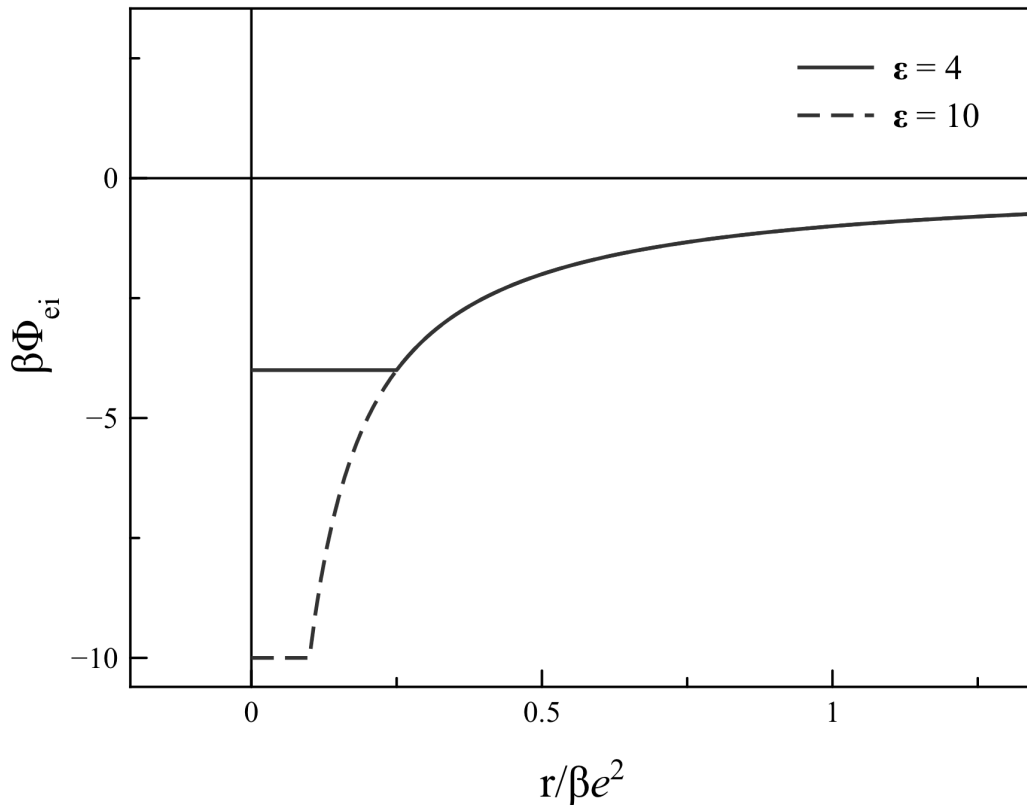


Рис. 28. Графическое представление электрон–ионных псевдопотенциалов для $\varepsilon = 4$ и 10 .

В работе [65] было показано, что такая модель хорошо описывает экспериментальные результаты для двухкомпонентной плазмы, как в области слабой, так и сильной неидеальности. Это позволяет надеяться, что исследование термодинамических и корреляционных функций в этой модели может дать указание о возможности существования фазового перехода в реальной плазме в области применимости модели.

Термодинамические свойства этой базовой модели «кулон с полочкой» зависят от двух безразмерных параметров: глубины «полочки» ε и параметра неидеальности $\gamma = \beta e^2 n^{1/3}$ (n — концентрация частиц обоих знаков).

При этом можно показать [13], что поскольку Φ_{ei} определен в этой модели зависящим от температуры, то полная внутренняя энергия системы, как

производная от стат. суммы по β , будет зависеть от статистического среднего величины:

$$E \sim \sum_{i,j}^N [\Phi_{km}(r_{ij}) + \beta \partial \Phi_{km}(r_{ij}) / \partial \beta], \text{ где } km \text{ — } ei, ee, ii$$

А для $r_{ij} \leq \beta e^2 \varepsilon^{-1}$ (частицы «на полочке») $\Phi_{ei}(r_{ij}) + \beta \partial \Phi_{ei}(r_{ij}) / \partial \beta = 0$.

Это значит, что электрон–ионные взаимодействия на расстояниях r_{ij} меньше, чем $\beta e^2 \varepsilon^{-1}$ ($x \leq \varepsilon^{-1}$) не вносят вклада во внутреннюю энергию системы. С другой стороны, эти взаимодействия не вносят вклада и в величину $r \partial \Phi_{ei} / \partial r$, определяющую давление. Таким образом, для модели «кулон с полочкой» оказывается справедливым соотношение теоремы вириала (5.1) для каждого конкретного значения ε .

Кроме того, так как для данного ε все термодинамические функции зависят только от γ , для расчета удобно ввести безразмерные величины: энергию $E^* = \beta E / N$, давление $P^* = \beta P (\beta e^2)^3$, удельный объем $v^* = 1 / \gamma^3$, температуру $T^* = \varepsilon^{-1}$.

Теорема вириала (4.1) в новых безразмерных переменных может быть записана так:

$$P^* v^* = 1 + E^* / 3 \tag{5.2}$$

Еще одной особенностью модели «кулон с полочкой» по сравнению с КТС и с моделью Ван–дер–Ваальса является отсутствие явно выраженного значения свободного объема. Наличие подобия и справедливость теоремы вириала позволило проводить расчеты только внутренней и потенциальной энергии системы частиц.

5.2 Расчет термодинамических свойств модели методом Монте–Карло

Расчеты термодинамических и корреляционных функций проводились классическим методом Монте–Карло (с использованием алгоритма Метрополиса) в NVT ансамбле для системы, состоящей из равного числа протонов и электронов, с периодическими граничными условиями. Была исследована область концентраций $n < 10^{-15} \text{ см}^{-3}$ и $T < 100$ К. При этом параметр неидеальности γ менялся от 0.01 до 100, а ϵ от 2 до 1000. Выбор таких n и T обусловлен необходимостью устойчивости расчетов при большом изменении γ и ϵ . Для учета дальнего действия использовался широко применяемый метод ближайшего образа. Зависимость результатов расчетов от числа частиц в ящике Монте–Карло была проверена в диапазоне 100 — 4000 частиц. Эта зависимость была учтена при оценке погрешности, указанной на рисунках.

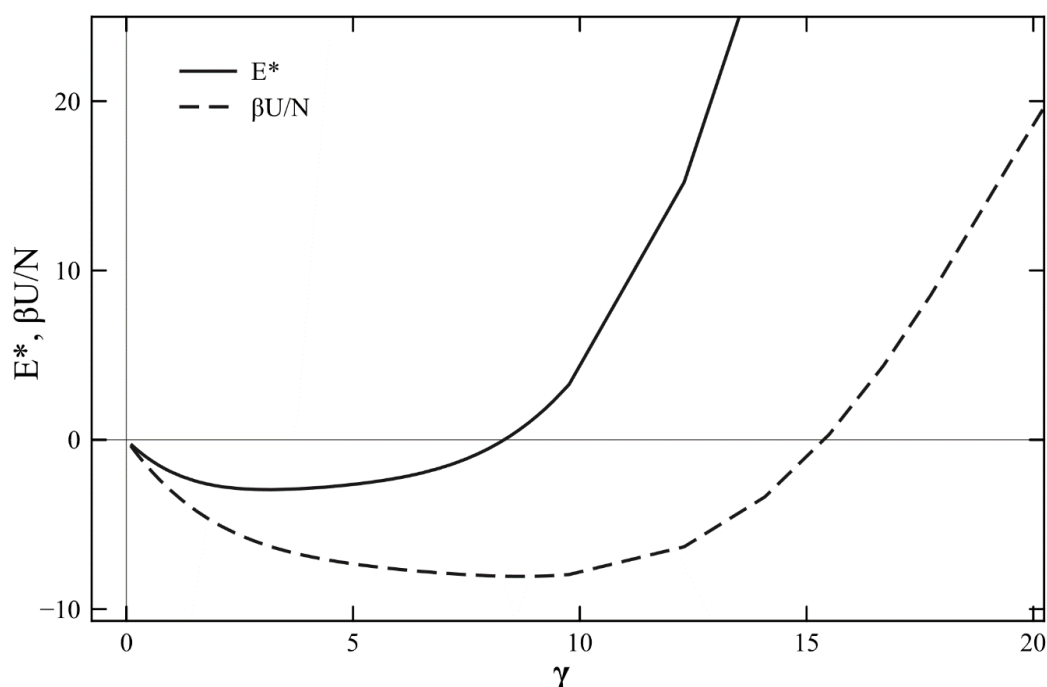


Рис. 29. Удельная внутренняя энергия и удельная потенциальная энергия взаимодействия для $\epsilon = 13.5$

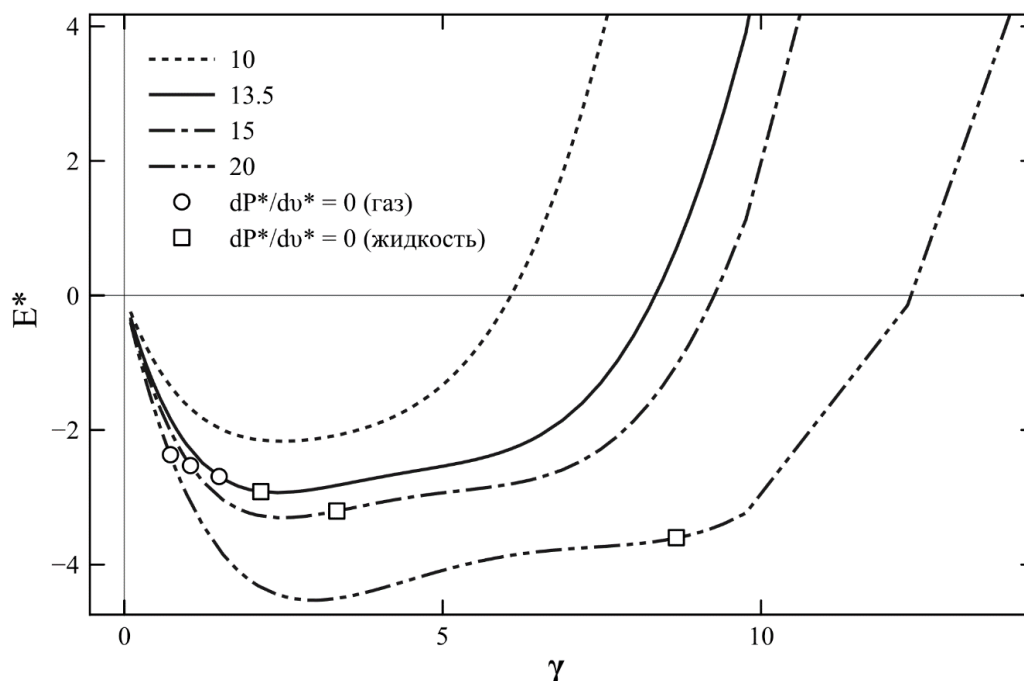


Рис. 30. Удельная внутренняя энергия в зависимости от параметра неидеальности для разных ϵ . Здесь и далее квадратными и круглыми маркерами ограничена область термодинамической неустойчивости со стороны газообразной и жидкой фазы.

На рис. 29 и 30 представлены результаты расчетов удельной потенциальной энергии взаимодействия $U^* = \beta U/N$ и внутренней энергии E^* в зависимости от γ и ϵ . Как сказано выше, в отличие от энергии взаимодействия, внутренняя энергия не содержит вклада от взаимодействия электрон–ион на расстояниях в районе полочки. Поэтому U^* глубже чем E^* . В области $\gamma \sim 1.5-2.8$ энергия на одну частицу для всех ϵ проходит через минимум, а затем начинает возрастать и для больших γ становится положительной и пропорциональной γ , что связано с преобладанием в системе отталкивания при достижении определенной плотности.

Все результаты численных расчетов внутренней энергии E аппроксимировались полиномами по степеням γ . Эти аппроксимационные выражения использовались во всех дальнейших расчетах. Поэтому на всех

рисунках результаты представлены в виде гладких кривых. Была сделана оценка ошибки такой аппроксимации и учтена при получении конечных результатов. В таблице 2 приведены типичные результаты расчета потенциалов для нескольких характерных точек.

Поскольку для модели «кулон с полочкой» при заданном ϵ справедлива теорема вириала (5.2), то зная E^* , можно определить давление P^* . На рис. 31 представлены значения P^* для различных γ и ϵ . Кривые $P^*(v^*)$ имеют вид, характерный для систем, описываемых уравнением Ван-дер-Ваальса. При уменьшении T^* (ϵ^{-1}) на кривых появляются два экстремума и область отрицательных значений P^* . Это указывает на то, что в модели существует фазовый переход типа газ–жидкость.

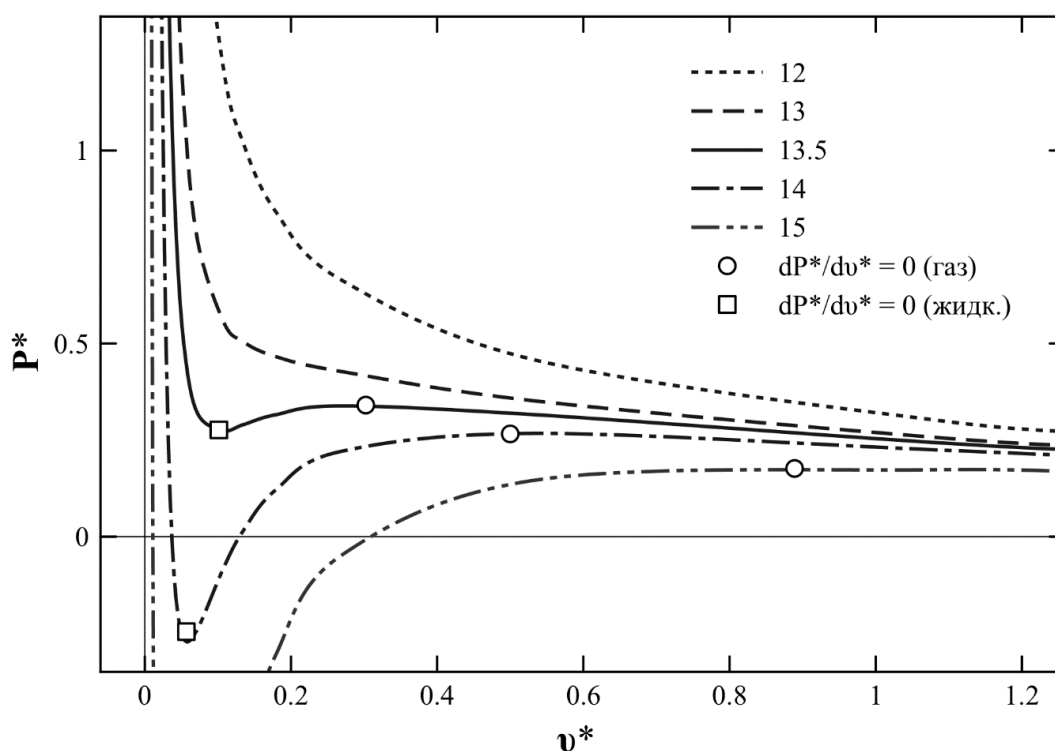


Рис. 31. Графики давления для различных ϵ (T^*).

Таблица 2. Исходные результаты расчетов удельной внутренней энергии системы частиц методом Монте–Карло. Характерные ε — выше крит. точки ($\varepsilon = 6$), вблизи крит. точки ($\varepsilon = 12$) и ниже крит. точки ($\varepsilon = 15$)

γ	$\varepsilon = 6$	$\varepsilon = 12$	$\varepsilon = 15$
0.10	-0.09	-0.09	-0.09
0.15	-0.18	-0.17	-0.20
0.21	-0.28	-0.30	-0.31
0.27	-0.40	-0.49	-0.45
0.33	-0.52	-0.73	-0.77
0.38	-0.64	-0.88	-1.02
0.42	-0.72	-1.02	-1.07
0.45	-0.73	-1.09	-1.23
0.57	-0.86	-1.44	-1.61
0.72	-0.93	-1.88	-2.14
0.82	-1.10	-2.08	-2.47
0.91	-1.17	-2.19	-2.55
0.98	-1.13	-2.29	-2.65
1.55	-1.25	-2.58	-3.42
1.77	-1.26	-2.49	-3.44
1.95	-1.26	-2.77	-3.35
2.41	-1.19	-2.46	-3.34
2.85	-0.93	-2.51	-3.25
3.19	-0.66	-2.37	-3.17
3.60	0.00	-2.60	-3.18
3.71	0.18	-2.44	-3.06
4.12	1.16	-2.30	-3.11
4.46	2.25	-2.35	-2.85
4.82	3.76	-2.76	-3.35
5.30	6.31	-1.86	-3.00
5.71	9.02	-2.23	-2.47
6.39	14.65	-1.39	-2.86
6.88	19.87	-0.70	-2.73
7.19	23.18	-0.29	-2.28
7.48	26.61	0.07	-2.03
8.00	34.49	1.25	-1.89
8.46	41.72	2.60	-1.21
8.87	49.62	4.02	-0.68
9.06	53.55	4.57	-0.22
9.25	57.25	5.73	0.13
9.76	69.05	7.92	0.86
12.30	146.23	24.70	10.25

5.3 Результаты расчетов: уравнение состояния и фазовый переход

5.3.1 Спинодаль

Спинодаль, как известно — граница метастабильных состояний в области фазового перехода газ–жидкость. Ее максимальное значение в координатах (P^*, v^*) совпадает со значением критической точки. Граница метастабильных состояний со стороны газа и жидкости определяется условием $(\partial P^*/\partial v^*)_{T^*} = 0$ [66]. На основе аппроксимации $P^*(v^*)$ полиномами в зависимости от γ были найдены значения P^* при $(\partial P^*/\partial v^*)_{T^*} = 0$ как со стороны газовой, так и жидкой фазы. На рис. 32 представлены результаты расчетов спинодали с указанием ошибки, которая здесь и на следующих рисунках в основном определялась ошибкой аппроксимации расчетных данных полиномами по γ и в меньшей степени за счет конечного числа частиц N в ячейке Монте–Карло, пропорциональной $1/\sqrt{N}$.

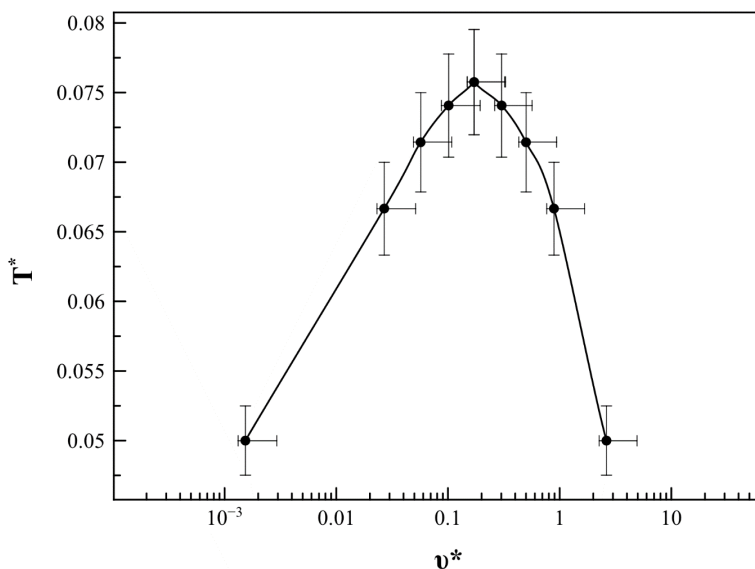


Рис. 32. График спинодали. Ошибка определяется в первую очередь ошибкой аппроксимации расчетных данных, во вторую — зависимостью результатов расчета методом Монте–Карло от числа частиц.

Как видно на графике, все точки спинодали могут быть описаны куполообразной кривой с вершиной. Эта вершина определяет критическую точку. Были определены параметры этой точки:

$$P_{crit}^* \approx 0.39, \quad v_{crit}^* \approx 0.17, \quad T_{crit}^* \approx \frac{1}{13}$$

Для этой точки также были проверены известные условия существования [66]:

$$(\partial^2 P^* / \partial v^{*2})_{T^*} = 0, \quad (\partial^3 P^* / \partial v^{*3})_{T^*} < 0$$

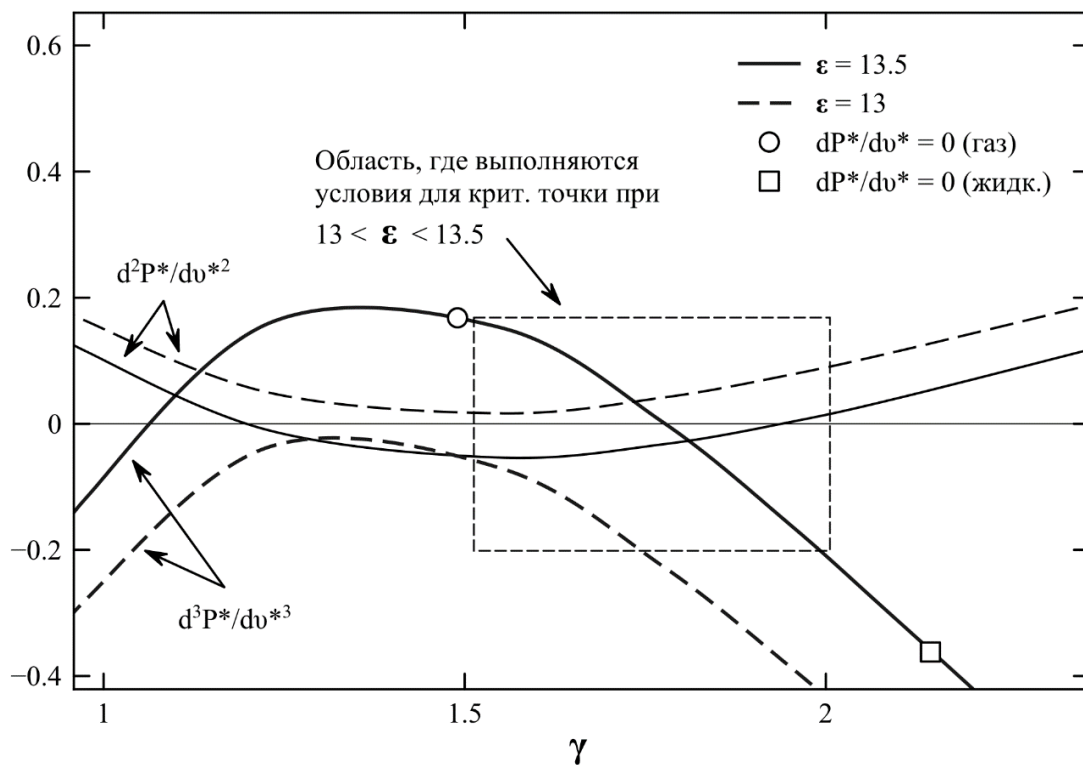


Рис. 33. Графики вторых и третьих производных давления по объему для двух расчетных значений T^* , ограничивающих область критической точки.

5.3.2 Бинодаль

Аппроксимационные выражения для $P^*(v^*)$ также можно использовать для расчета бинодали — кривой, ограничивающей двухфазную область. Для этого [66] нужно, чтобы при $T^* = const$ удовлетворялись следующие равенства:

$$P^*(v_1^*) = P^*(v_2^*), \quad \mu(v_1^*) = \mu(v_2^*) \quad (5.3)$$

где μ — химический потенциал, а индексы 1 и 2 соответствуют точкам пересечения изотермы и кривой фазового равновесия.

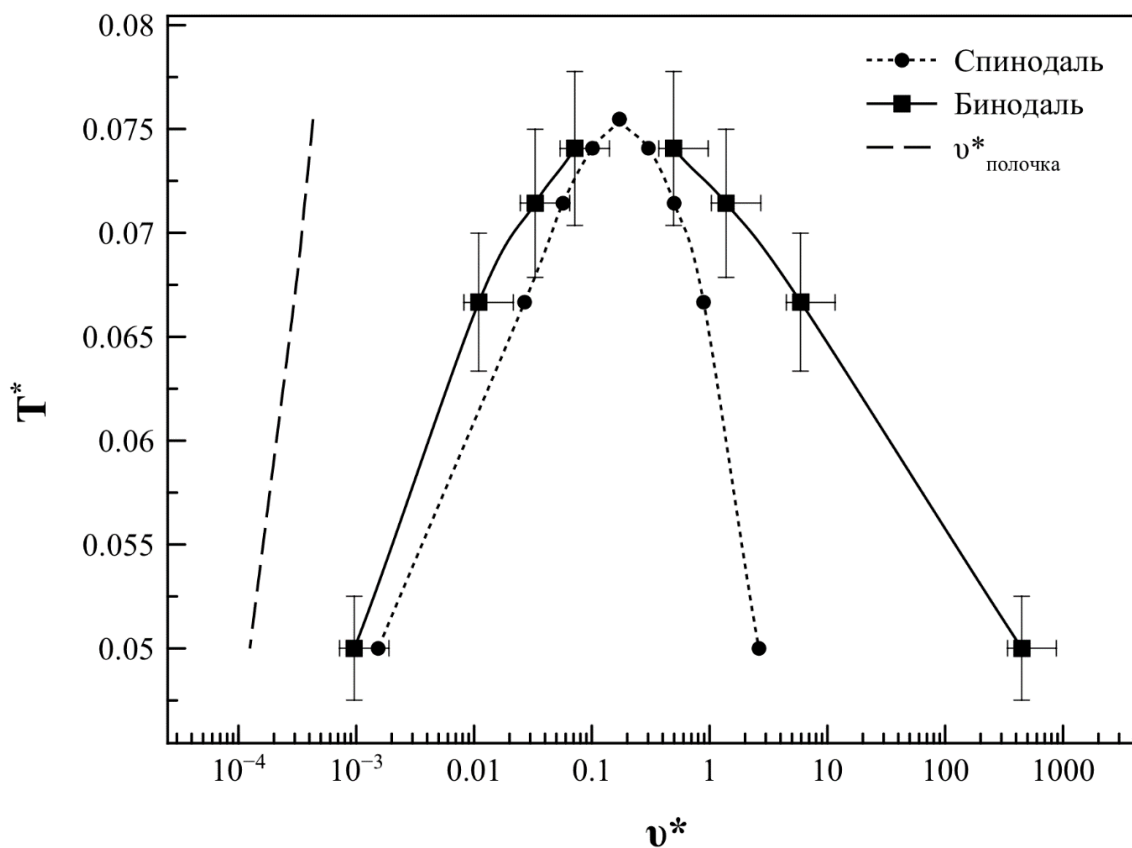


Рис. 34. Графики бинодали и спинодали. Пунктиром отмечен объем, определяемый геометрическим размером полочки, $v^*_{\text{полочка}} = 1/\varepsilon^3$.

На рис. 34 представлены результаты расчетов точек бинодали. Вершина бинодали, как и спинодали находится в критической точке. Но нужно учесть, что условия (5.3), которые были использованы для расчета бинодали, соответствуют правилу

Максвелла [67]. То есть осуществляется интегрирование кривой $P^*(v^*)$ (см. рис. 31) по v^* , которое включает нефизическую область термодинамической неустойчивости, где $(\partial P^*/\partial v^*)_{T^*} > 0$. В связи с этим нет уверенности, что результаты проделанных расчетов действительно являются точками бинодали. Однако это можно проверить. Для этого надо провести расчет точек бинодали, реализуя переход из точки 1 в точку 2 при помощи квазистатического процесса через физические области фазовой диаграммы, как показано на рис. 35. В [67] было показано, что в частном случае модели Ван–дер–Ваальса расчет бинодали по правилу Максвелла и при помощи квазистатического процесса совпадают.

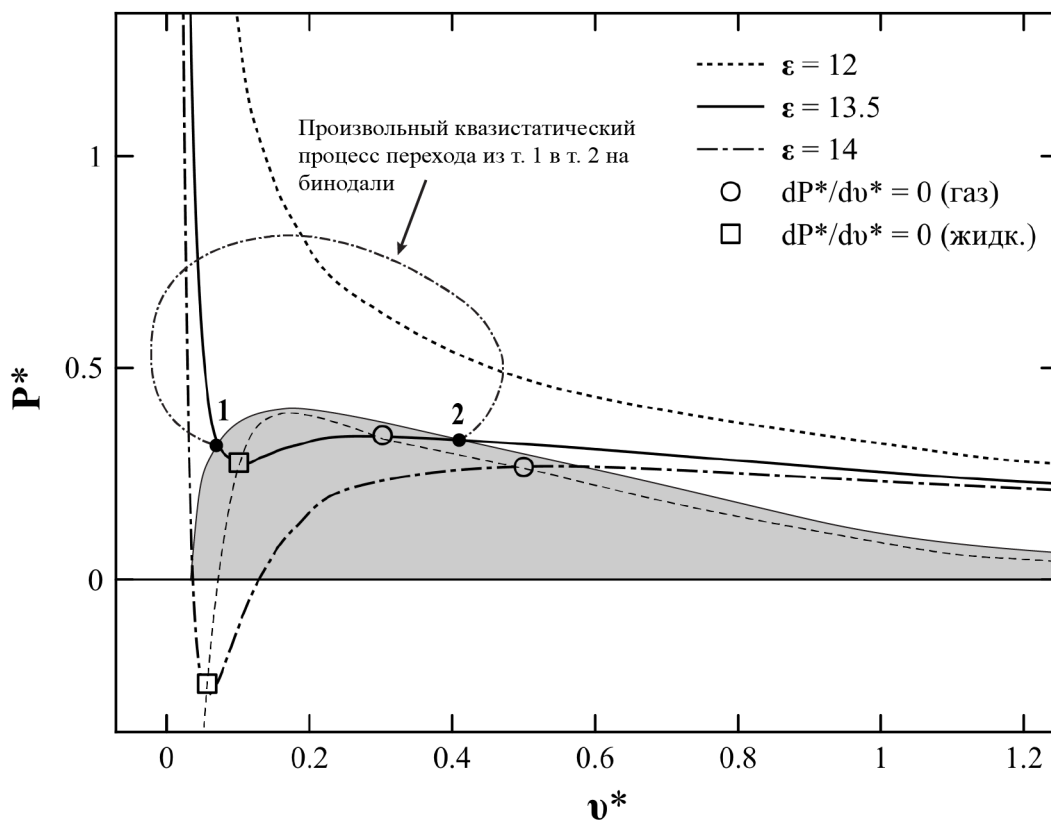


Рис. 35. Пример произвольного квазистатического процесса в равновесной области, где имеет смысл полученная функция $P^*(v^*)$

Применим метод, разработанный в [67], для модели «кулон с полочкой». Рассмотрим разность термодинамических потенциалов Гиббса для точек 1 и 2 — на изотерме она должна равняться нулю. В приведенных переменных нашей модели она имеет вид:

$$E_1^* - E_2^* - T^*(S_1^* - S_2^*) + P^*(v_1^* - v_2^*) = 0 \quad (5.4)$$

где $S^* = S/N$ — приведенная энтропия.

Учитывая теорему вириала (5.2), преобразуем (5.4) к виду

$$T^*(S_1^* - S_2^*) = 4P^*(v_1^* - v_2^*) \quad (5.5)$$

Следуя [67], запишем выражение для энтропии

$$S_1^* - S_2^* = \int_1^2 \left(\frac{\partial P^*}{\partial T^*} \right)_{v^*} dv^* + \int_1^2 \frac{1}{T^*} c_{v^*}(T^*) dT^* \quad (5.6)$$

где $c_{v^*}(T^*)$ — приведенная теплоемкость на одну частицу.

Это выражение справедливо, если $\left(\frac{\partial P^*}{\partial T^*} \right)_{v^*} = const$ [67]. Причем последнее слагаемое исчезает, т. к. температуры в точке 1 и 2 одинаковы. Численно рассчитанные в модели «кулон с полочкой» зависимости давления от температуры показывают, что для $0.015 < v^* < 15$ при $0.07 < T^* < 0.25$ можно полагать $\left(\frac{\partial P^*}{\partial T^*} \right)_{v^*} \cong const$. Если найденные по правилу Максвелла точки v_1^* и v_2^* верны, то обе части равенства (5.5) должны совпасть.

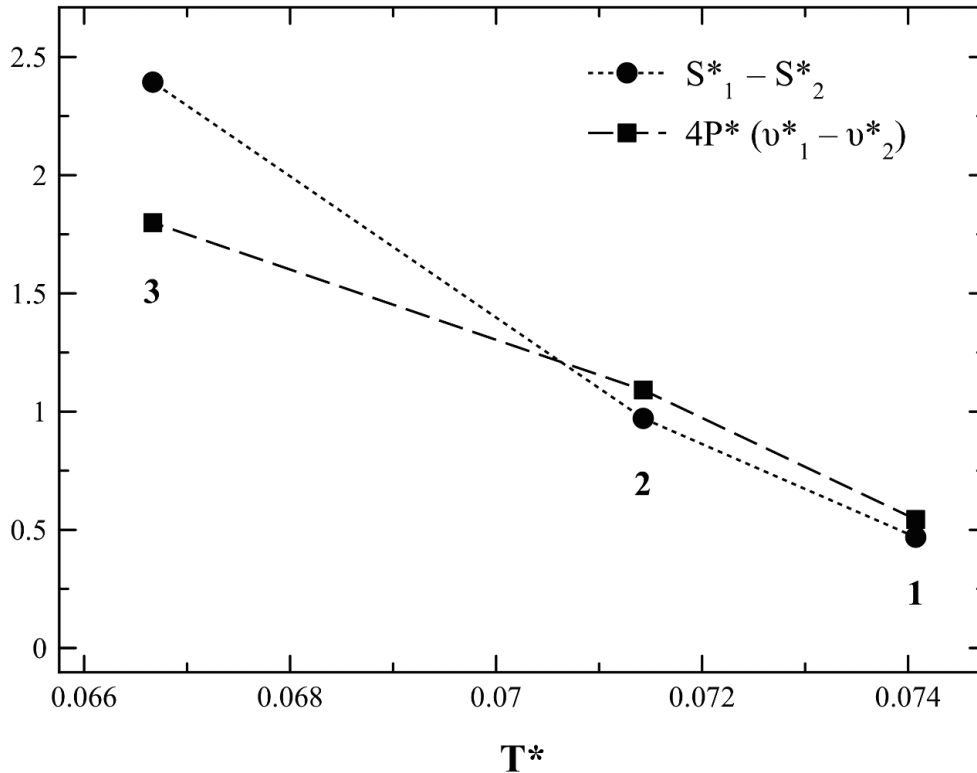


Рис. 36. Сравнение результатов «некорректного» (по правилу Максвелла) и корректного способов нахождения точек бинодали. Точка 1: $\varepsilon = 13.5, P^* = 0.322, v_1^* = 0.494, v_2^* = 0.072$. Точка 2: $\varepsilon = 14, P^* = 0.203, v_1^* = 1.38, v_2^* = 0.033$. Точка 3: $\varepsilon = 15, P^* = 0.076, v_1^* = 5.94, v_2^* = 0.011$

На рис. 36 представлены результаты расчета по формулам (5.3) и (5.6) для различных T^* . Видно, что равенство (5.3) выполняется с точностью 10–20% вплоть до $T^* = 1/15$. Поэтому можно утверждать, что в модели «кулон с полочкой» в диапазоне температур $1/15 < T^* < 1/13$ расчет по правилу Максвелла приводит к качественно верным результатам. Отличие значений $T^*(S_1^* - S_2^*)$ от $4P^*(v_1^* - v_2^*)$ при $T^* < 1/15$ будет увеличиваться из-за того, что для $v^* < 0.015$ перестанет выполняться равенство $\left(\frac{\partial P^*}{\partial T^*}\right)_{v^*} = const$. Стоит отметить, что ошибка определения бинодали, связанная с некорректностью применения правила Максвелла, находится в пределах ошибки расчета методом Монте–Карло,

связанной с конечностью числа частиц в ячейке и в пределах погрешности аппроксимации результатов расчета полиномами.

5.3.3 Корреляционные функции

Для понимания характера фазового перехода большое значение имеет также сравнение вида парных корреляционных функций для частиц одного и разных знаков заряда в газовой и жидкой области фазовой диаграммы вблизи кривой раздела фаз. На рис. 38 и 39 приведены парные корреляционные функции для различных изотерм вблизи газовой и жидкой ветви кривой равновесия. На рисунках приведены также значения среднего расстояния $r_{\text{ср.}} = \sqrt[3]{v^*}$ и размера «полочки» равного ϵ^{-1} . Стоит отметить, что максимум корреляционной функции электрон–ион находится вне пределов полочки как в газовой, так и в жидкой фазе. Это может означать, что в образовании жидкой фазы играет роль не столько наличие полочки в потенциале взаимодействия электрон–ион, сколько паритет между кулоновским отталкиванием и притяжением в двухкомпонентной системе частиц.

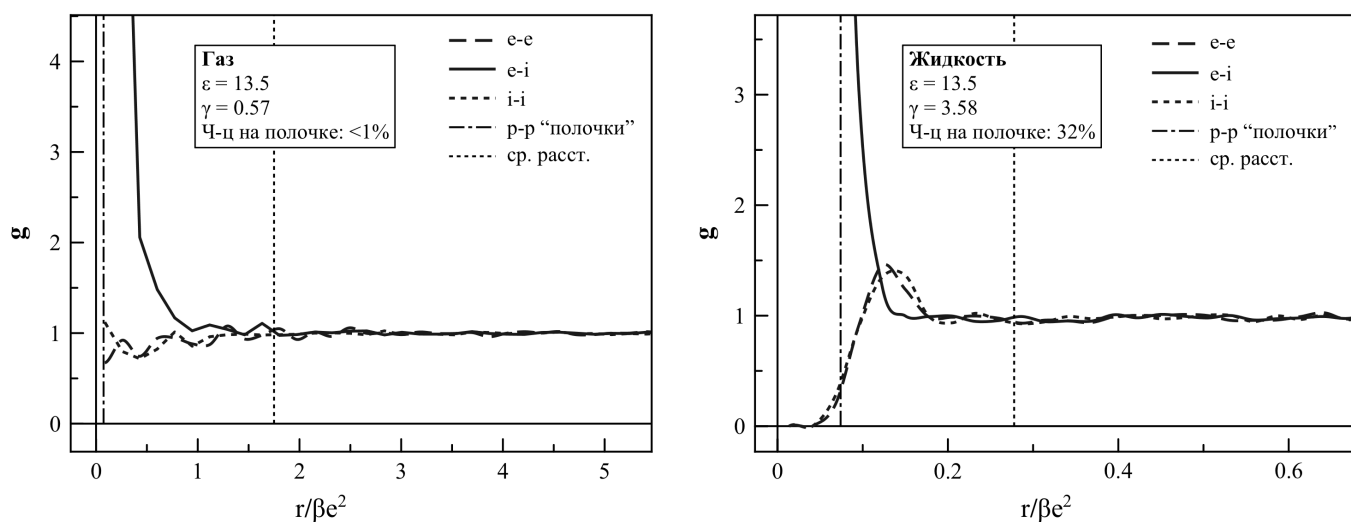


Рис. 37. Парные корреляционные функции для $T^* = 1/13.5$ в приведенных координатах (расстояние нормировано на длину Ландау $\beta\epsilon^2$). Отмечена доля $e-i$ пар, находящихся на расстоянии меньше размера полочки.

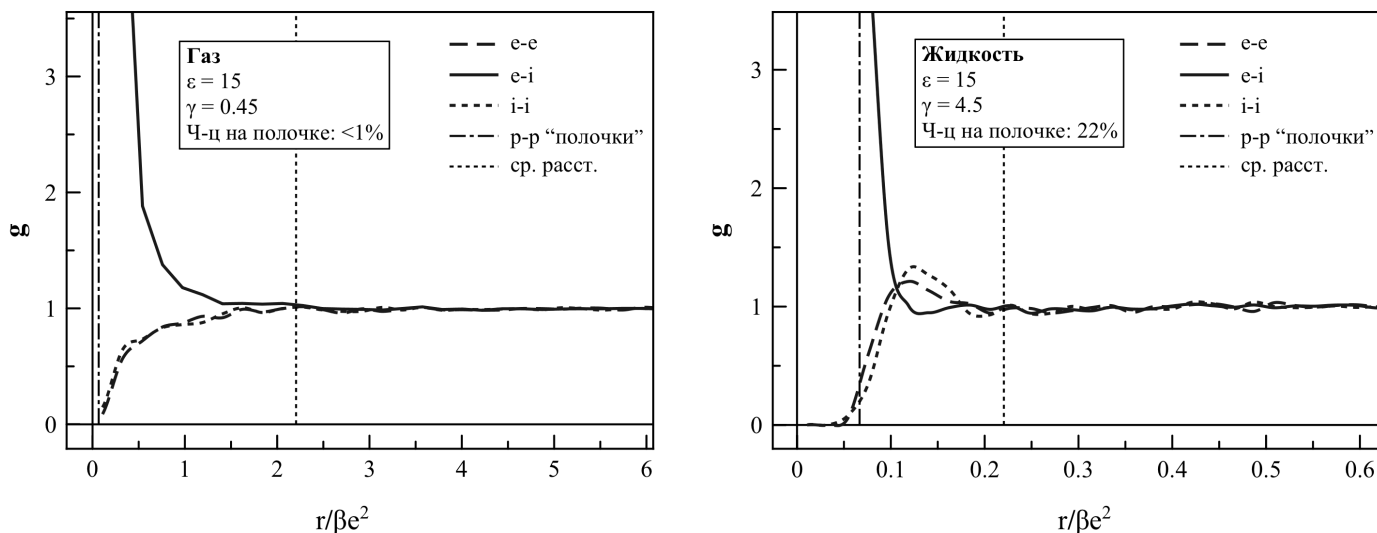


Рис. 38. Парные корреляционные функции для $T^* = 1/15$ в приведенных координатах (расстояние нормировано на длину Ландау βe^2). Отмечена доля $e-i$ пар, находящихся на расстоянии меньше размера полочки.

При этом корреляционные функции электрон–ион по обе стороны кривой раздела фаз качественно друг от друга не отличаются. Что касается корреляционных функций зарядов одного знака, то видно характерное для жидкости формирование ближнего порядка. Кроме того, при дальнейшем увеличении неидеальности системы, для них характерно появление в жидкой фазе дополнительных максимумов за пределами полочки. Это говорит о формировании дополнительного порядка в системе частиц, видимо в какой–то мере отвечающего за фазовый переход.

Итак, основным результатом данной главы является развитая модель «кулон с полочкой». Впервые численными методами исследованы термодинамические свойства этой модели: получены уравнения состояния, корреляционные функции, кривая границы метастабильных состояний, кривая фазового равновесия и параметры критической точки фазового перехода типа газ–жидкость:

$$P_{crit}^* \approx 0.39, \quad v_{crit}^* \approx 0.17 (\gamma_{crit} \approx 1.8), \quad T_{crit}^* \approx \frac{1}{13} \approx 0.076$$

5.4 Выводы

Основными результатами данной главы можно считать результаты расчетов термодинамики модели «кулон с полочкой» в широком диапазоне параметров (уравнения состояния, корреляционные функции и др.) и обнаруженный фазовый переход типа «газ–жидкость». А также рассчитанные значения критической точки, линий бинодали и спинодали.

Заключение

Заключительная глава диссертации состоит из двух частей: в первой приводятся некоторые общие выводы и предположения относительно полученных результатов для ридберговской плазмы, во второй кратко перечислены основные результаты работы.

Выводы

При рассмотрении модели «кулон с полочкой» предполагалось, что полочка зависит от температуры таким образом, что псевдопотенциал взаимодействия электрон–ион на малых расстояниях $\Phi_{ei}(r) = \varepsilon kT$. Можно рассмотреть другой вариант, когда

$$\Phi_{ei}(r) = \varepsilon^*, \text{ где } \varepsilon^* = \text{const}$$

Причем это значение ε^* не зависит от температуры (например, значение потенциала ионизации атома). Для такой модели термодинамические функции также будут зависеть от безразмерных параметров $\beta\varepsilon^*$ и γ , но не будет выполняться соотношение теоремы вириала (5.1). При этом внутренняя энергия будет включать в себя вклад от взаимодействия электрон–ион, соответствующий $\varepsilon^* = \text{const}$, а в давление, как и в предыдущем варианте модели, эта часть взаимодействия вклада давать не будет. Поэтому фазовая диаграмма в координатах P^*, v^* будет такой же, как на рис. 32. Роль приведенной температуры в этом случае будет играть значение $(\beta\varepsilon^*)^{-1}$. Для этого варианта модели положение критической точки для заданного ε^* будет зависеть от температуры T и наоборот.

Модель «кулон с полочкой» может быть использована как базовая модель для расчета по теории возмущений свойств изучаемой в работе ридберговской плазмы (аналогично [13]). В этом однако нет необходимости, поскольку

существует более точный численный метод определения конфигурационного интеграла системы (глава 3). Но важно качественно показать соответствие модели «кулон с полочкой» и модифицированной псевдопотенциальной модели ридберговской плазмы. Это можно сделать, сравнив, например, расчетные точки n - T диаграмм и бинодали соответствующих потенциалов «кулона с полочкой».

Например, псевдопотенциал с учетом вклада уровней дискретного спектра > 36 (см. рис. 15) при температуре 10 К можно считать полочкой с $\varepsilon \approx 14$, а при температуре 5 К полочкой с $\varepsilon \approx 25$. Для уровней > 10 и температуры 1000 К — условно полочкой $\varepsilon \approx 3$, 100 К — $\varepsilon \approx 18$.

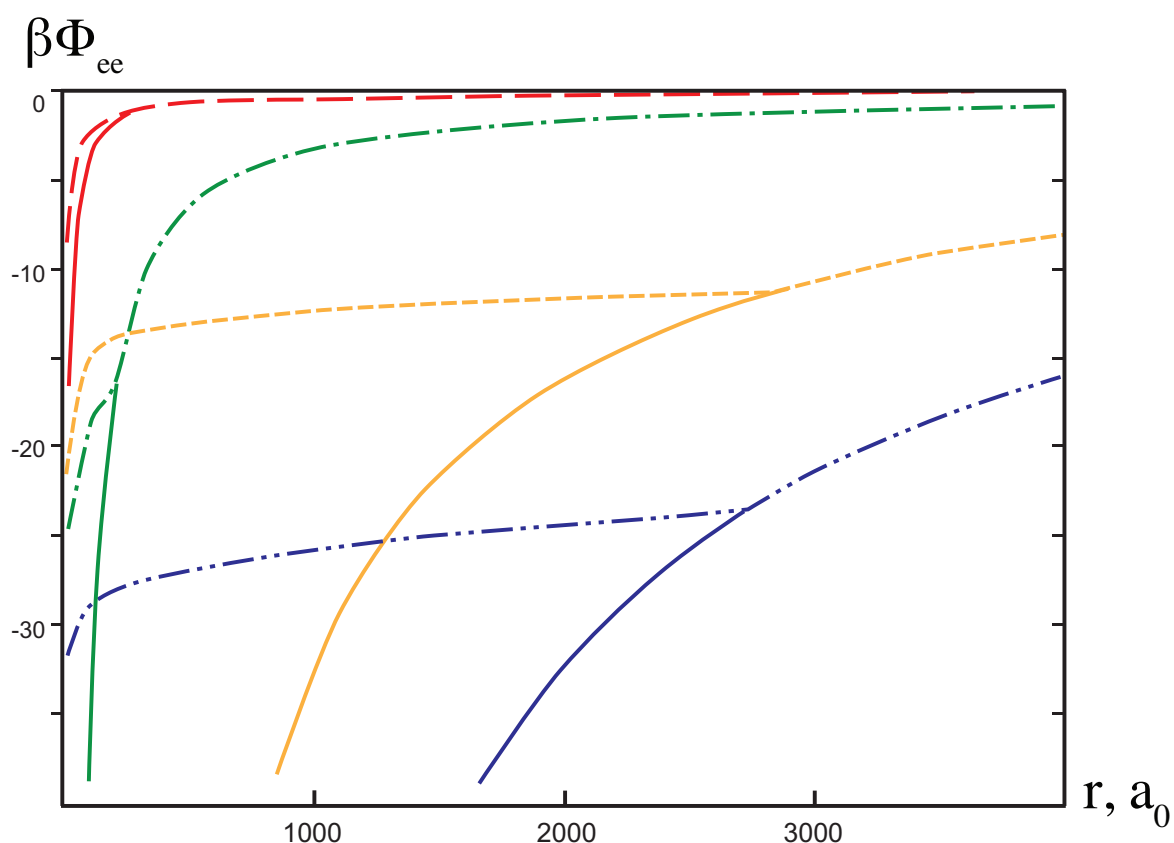


Рис. 15 (повтор). Ион–электронные псевдопотенциалы, рассчитанные по ϕ -лам (2.9), (2.10), начиная с 10 уровня возбуждения: **длинный пунктир** — температура 1000 К, **штрих–пунктир** — температура 100 К; начиная с 36 уровня возбуждения: **короткий пунктир** — температура 10 К, **2 точки–пунктир** — температура 5 К в сравнении с кулоновскими потенциалами — сплошные линии при соответствующих температурах.

Отметив на графике бинадали (рис. 34) эти точки (рис. 21 и 25), получим совпадение областей «газового» и «жидкого» состояний ридберговской плазмы с фазовой диаграммой «кулона с полочкой» (рис. 39).

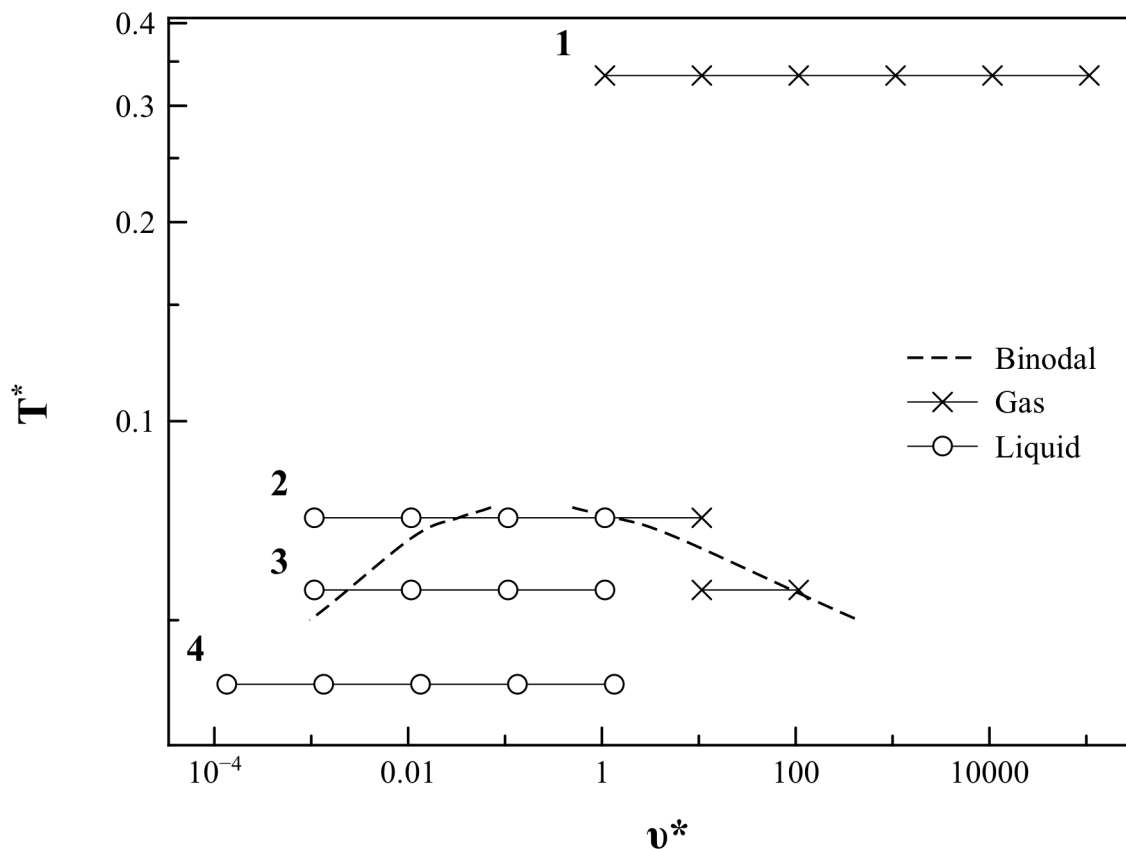


Рис. 39. Точки фазовых диаграмм рис. 21 и 25 модифицированной псевдопотенциальной модели в координатах бинадали модели «кулон с полочкой».

1 — псевдопотенциал с учетом уровней, начиная с 10-го при 1000 K,

2 — псевдопотенциал с учетом уровней, начиная с 36-го при 10 K,

3 — псевдопотенциал с учетом уровней, начиная с 10-го при 100 K,

4 — псевдопотенциал с учетом уровней, начиная с 36-го при 5 K.

Работа над моделью «кулон с полочкой», несмотря на множество уже полученных данных, далека от завершения. Следующий интересный теоретический вопрос, который только предстоит исследовать в этой модели — фазовый переход типа «жидкость–кристалл».

Также остается открытым вопрос соответствия описанного здесь «ридберговского» фазового перехода — т. н. кулоновскому фазовому переходу, экспериментальное обнаружение которого пока остается под вопросом. В этом, хочется надеяться, модели «кулон с полочкой» еще предстоит сыграть свою роль. В 1967 году в [68] на основе анализа экстраполяции уравнения полностью ионизованной слабонеидеальной плазмы в область сильной неидеальности было высказано предположение о возможности существования фазового перехода, обусловленного кулоновским взаимодействием. На протяжении прошедших с того времени лет экспериментально обнаружить этот переход не удалось, хотя его возможность интенсивно обсуждалась и не исключается [63, 69].

Исходя из полученных в работе критических параметров ($P_{crit}^* \approx 0.39, v_{crit}^* \approx 0.17$ ($\gamma_{crit} \approx 1.8$), $T_{crit}^* \approx \frac{1}{13} \approx 0.076$), можно оценить возможность наблюдения «ридберговского» фазового перехода в реальной термодинамически равновесной плазме. Необходимо учесть тот факт, что для плазмы конкретного химического элемента, например водорода или цезия, наименьшее возможное значение электрон–ионного псевдопотенциала соответствует $-\beta I$, где I — потенциал ионизации атома. Такой выбор глубины псевдопотенциала определяет максимально возможную температуру плазмы, соответствующую переходу в двухфазную область. Для водорода и цезия она будет равна соответственно 12000 К и 3500 К. То есть кулоновский фазовый переход для плазмы этих элементов возможен, когда температура плазмы ниже этих значений. Но даже при этих температурах степень ионизации столь мала, что условие для критической точки $v_{crit}^* = 1/\gamma^3 \approx 0.17$ приводит к очень большой концентрации нейтральных частиц. В результате нарушаются условия применимости модели, в которой пренебрегается взаимодействием нейтральных частиц между собой и с зарядами. Другими словами, полученные результаты для модели «кулон с полочкой» позволяют предположить, что причиной отсутствия экспериментального подтверждения может быть сложность получения плазмы подходящих параметров и трудности, связанные с ее диагностикой.

Основные результаты диссертации

1. Модифицированная псевдопотенциальная модель неидеальной ридберговской плазмы, состоящей из свободных электронов, ионов и водородоподобных атомов, у которых реализуется только часть возможных высоковозбужденных состояний. В этой модели исследована область температур 1–1000 К, и концентраций 10^2 – 10^{16} см⁻³.
2. Псевдопотенциалы электрон–ионного взаимодействия, рассчитанные по водородным волновым функциям в области низких температур (< 100 К).
3. Показано (на основе сравнения результатов расчета матрицы плотности [17] с результатами квазиклассического приближения [13]), что точность квазиклассического подхода к расчету взаимодействия в ридберговской плазме растет с понижением температуры.
4. Внутренние энергии и парные корреляционные функции, рассчитанные методом Монте–Карло в модифицированной псевдопотенциальной модели в широкой области параметров. В том числе, соответствующих экспериментальным ([3–7] и [8–11]).
5. Обнаружено формирование структуры при значениях параметра неидеальности $\gamma \geq 1$. Формирование структуры происходит в области, когда газ электронов далек от вырождения ($n\lambda^3 \ll 1$), а сама структура меняется от ближнего порядка (аналогично структуре в жидкости) до дальнего порядка (аналогично решетке в твердых телах). Учет различных состояний дискретного спектра, приводит к изменению свойств ридберговской плазмы. В настоящей работе проведен теоретический расчет термодинамической модели ультрахолодной неидеальной ридберговской плазмы для случаев, когда: плотный ионизованный газ сформирован из ридберговских атомов с уровнем возбуждения $k = 36$ и выше плюс состояния непрерывного спектра

[11], и плотный ионизованный газ сформирован из ридберговских атомов с уровнем возбуждения $k = 10$ и выше плюс состояния непрерывного спектра. И в том и в другом случае расчеты говорят о формировании структуры при $\gamma \geq 1$. Учет состояний с меньшими k приводит к изменению свойств этого газа. При этом для конкретных концентраций и температур энергия уменьшается, и это приводит к переходу такой плазмы из неустойчивого в метастабильное состояние.

6. Термодинамические свойства модели «кулон с полочкой» [64], исследованные впервые численными методами в широкой области параметров. Получены уравнения состояния, парные корреляционные функции, внутренние энергии и давление.
7. Фазовый переход типа «газ–жидкость», обнаруженный в модели «кулон с полочкой». Найдены кривые границы метастабильных состояний, фазового равновесия, и рассчитаны параметры критической точки:

$$P_{crit}^* \approx 0.39, \quad v_{crit}^* \approx 0.17 (\gamma_{crit} \approx 1.8), \quad T_{crit}^* \approx \frac{1}{13} \approx 0.076$$

В заключение хочется выразить огромную благодарность моему научному руководителю Борису Вигдоровичу Зеленеру за наставничество, помощь в постановке задачи и проведении этой работы. Выражаю признательность Эдуарду Анатольевичу Манькину и Борису Борисовичу Зеленеру за тесное сотрудничество и поддержку. Благодарен также Владимиру Сергеевичу Филинову и Александру Львовичу Хомкину, чья помощь и критика оказали неоценимый вклад в результаты данной работы.

Список литературы

1. Маныкин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. О коллективном электронном состоянии в системе сильновозбужденных атомов // ДАН СССР. – 1981. – N 260. – с. 1096.
2. Маныкин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. Теория конденсированного состояния в системе возбужденных атомов // ЖЭТФ. – 1983. – N 84. – с. 442.
3. Райс Т., Хенсел Дж., Филлипс Т., Томас Г. Электронно–дырочная проводимость в полупроводниках / М.: Мир, 1980.
4. C. Aman, J. B. C. Pettersson, L. Holmlid, Field ionizable cesium metal clusters from a foil diffusion source // Chem. Phys. – 1990. – N 147. – с. 189–197.
5. R. S. Svensson, L. Holmlid, L. Lundgren, Semi-conducting low pressure, low temperature plasma of cesium with unidirectional conduction // J. Appl. Phys. – 1991. – N 70. – с. 1489–1492.
6. C. Aman, J. B. C. Pettersson, H. Lindroth, L. Holmlid, Visible luminescence from particles on surfaces: Evidence of de-excitation of Rydberg matter // J. Matter Res. – 1992. – N 7. – с. 100–104.
7. R. Svenson, L. Holmlid, Electronic Raman processes in Rydberg Matter of Cs: circular Rydberg states in Cs and Cs⁺ // Phys. Rev. Lett. – 1999. – N 83. – с. 1739–1742.
8. T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson et al, Creation of an ultracold neutral plasma // Phys. Rev. Let. – 1999. – vol. 83 N 23. – с. 4776.
9. S. Kulin, T. C. Killian, S. D. Bergeson and S. L. Rolston, Plasma Oscillations and Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Let. – 2000. – vol. 85 N 2. – с. 318.

10. T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al, Formation of Rydberg Atoms in an Expanding Ultracold Neutral Plasma // *Phys. Rev. Let.* – 2001. – vol. 86 N 17. – с. 3759.
11. M. P. Robinson, B. L. Tolra, M. W. Noel et al, Spontaneous Evolution of Rydberg Atoms into an Ultracold Plasma // *Phys. Rev. Let.* – 2000. – vol. 85 N 21. – с. 4466.
12. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов. Метод Монте–Карло в статистической термодинамике / М.: Наука, 1977.
13. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов. Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике / М.: Наука, 1981.
14. P. Debye and E. Hückel, The theory of electrolytes. I. Lowering of freezing point and related phenomena // *Physikalische Zeitschrift.* – 1923. – N 24. – с. 185–206
15. Barker A. A. Effective Potentials between the Components of a Hydrogeneous Plasma // *J. Chem. Phys.* – 1971. – vol. 55 N 4. – с. 1751.
16. B. V. Zelener, G. E. Norman, V. S. Filinov, Pseudopotential model of a nonideal plasma // *High Temperature Science.* – 1976. – vol. 13 N 4. – с. 650–658
17. М. А. Бутлицкий, Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, Двухчастичная матрица плотности и псевдопотенциал электрон–протонного взаимодействия для ультранизких температур // *Жур. выч. мат. и мат. физ.* – 2008. – т. 48 №1. – с. 154–158.
18. M. A. Butlitsky, V. E. Fortov, E. A. Manykin, B. B. Zelener, B. V. Zelener, Thermodynamics of nonideal Rydberg plasma created by dye laser // *Laser Physics.* – 2005. – vol. 15 N 2. – с. 256.
19. Бутлицкий М. А., Зеленер Б. Б., Зеленер Б. В., Манькин Э. А., Хихлуха Д. Р. Функция распределения и кинетические процессы в ультрахолодном ридберговском веществе // *Ядерная физики и инжиниринг.* – 2012. – т. 3 №2. – с. 151

20. M. A. Butlitsky, B. V. Zelener and B. V. Zelener, Critical point of gas–liquid type phase transition and phase equilibrium functions in developed two–component plasma model // J. Chem. Phys. – 2014. –N 141. – с. 024511.
21. В. И. Ярыгин, В. Н. Сидельников, И. И. Касиков, В. С. Миронов, С. М. Тулин, Экспериментальное изучение возможности образования конденсата возбужденных состояний вещества (ридберговской материи) // Письма в ЖЭТФ. – 2003. – т. 77 N 6. – с. 330.
22. Э. А. Манькин, М. И. Ожован, П. П. Полуэктов, Конденсированные состояния возбужденных атомов цезия // ЖЭТФ. – 1992. – N 102. – с. 804.
23. Манькин Э. А., М. И. Ожован, П. П. Полуэктов // Химическая физика. – 1999. – т. 18 N 7. – с. 88.
24. Р. Стеббингс, Ридберговские состояния атомов и молекул / Под ред. Р. Стеббингса, Ф. Даннинга. – М.: Мир, 1987.
25. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д., Теория псевдопотенциала / М.: Мир, 1973.
26. Лундквист С. Теория неоднородного электронного газа / под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. – М.: Мир, 1987.
27. L. M. Sander, J. H. Rose, H. B. Rose, Charge-density waves in two- and three-dimensional jellium // Phys. Rev. B. – 1980. – N 21. – с. 2739.
28. Б. М. Смирнов, Отрицательные ионы / М.: Атомиздат, 1978, с. 176.
29. J. A. Alonso, L. C. Balbas, A nonlocal approximation to the correlation energy of inhomogeneous electron systems // Phys. Lett. – 1981. – N 81A. – с. 467.
30. Б. Б. Кадомцев, М. Б. Кадомцев, Конденсаты Бозе–Эйнштейна // УФН. – 1996. – N 167. – с. 649.
31. М. Бониц, Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, В. С. Филинов, В. Е. Фортов, Термодинамика и корреляционные функции ультрахолодной неидеальной ридберговской плазмы // ЖЭТФ. – 2004. – N 125. – с. 821.

32. Chen Y. C., Simien C. E., Laha S., Gupta P., Marinez Y. N., Mickelson P. G., Nagel S. B., Killian T. C., Electron Screening and Kinetic-Energy Oscillations in a Strongly Coupled Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – N 93. – 265003.
33. J. L. Roberts, C. D. Fertig, M. J. Lim, S. L. Rolston, Electron Temperature of Ultracold Plasmas // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – N 92. – с. 25.
34. Murillo M. S., Using Fermi Statistics to Create Strongly Coupled Ion Plasmas in Atom Traps // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – N 87. – с. 11.
35. S. G. Kuzmin and T. M. O’Neil, Numerical Simulation of Ultracold Plasmas: How Rapid Intrinsic Heating Limits the Development of Correlation // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – N 88. – с. 065003.
36. F. Robicheaux, J. D. Hanson, Simulation of the Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – N 88. – с. 055002.
37. А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко, Релаксация ридберговских состояний в ультрахолодной лазерной плазме // *Квантовая электроника.* – 2001. – N 31. – с. 1084.
38. A. N. Tkachev, S. I. Yakovlenko, On the Recombination Heating of Ultracold Laser-Produced Plasmas // *Laser Phys.* – 2001. – N 11. – с. 977.
39. Pohl T., Pattard T., Rost J. M., Kinetic modeling and molecular dynamics simulation of ultracold neutral plasmas including ionic correlations // *Phys. Rev. A.* – 2004. – N 70. – с. 033416.
40. Hahn Y., Relaxation of cold plasmas and threshold lowering effect // *Phys. Rev. E.* – 2001. – N 64. – с. 046409.
41. Hahn Y., Polarizability of Rydberg atoms and the dominant long-range interactions // *Phys. Rev. A.* – 2000. – N 62. – с. 042703.
42. M. W. C. Dharma-Wardana and F. Perrot, Energy relaxation and the quasiequation of state of a dense two-temperature nonequilibrium plasma // *Phys. Rev. E.* – 1998. – N 58. – с. 3705.

43. N. W. Ashcroft and D. Stroud, Theory of the Thermodynamics of Simple Liquid Metals // Solid State Phys. – 1978. – N 33. – с. 1.
44. Ю. И. Сыцько, С. И. Яковленко, Релаксация плазмы гелия в послесвечении и при разлете // ЖТФ. – 1976. – N 46. – с. 1006.
45. Ю. В. Коптев, Е. Л. Латуш, М. Ф. Сэм, Г. Д. Чеботарев, сб. Инверсная заселенность и генерация на переходах в атомах и малых молекулах / Томск: изд-е Томского университета, 1986, с. 35–36.
46. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / М.: Наука, 1966.
47. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Физическая кинетика / М.: Наука, 1979, с. 207.
48. Б. Б. Зеленер, Б. В. Зеленер, Э. А. Манькин, Кинетические процессы в неидеальной ридберговской материи // ЖЭТФ. – 2004. – т. 126 N 6. – с. 1344.
49. В. С. Воробьев, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, Статистическая теория плотной плазмы // ЖЭТФ. – 1970. – т. 57 N 3. – с. 838.
50. V. S. Filinov, E. A. Manykin, B. V. Zelener, B. V. Zelener, Ultracold Rydberg Plasma Produced by the Photoionization of Laser-Cooled Xenon Atoms // Laser Physics. – 2004. – vol. 14 N 2. – с. 186.
51. Storer R. G., Path-Integral Calculation of the Quantum-Statistical Density Matrix for Attractive Coulomb Forces // J. Math. Phys. – 1968. – N 9. – p. 964–970; Radial Distribution Function for a Quantum Plasma // Phys. Rev. – 1968. – N 176. – p. 326–331.
52. Ebeling W. Statistische Thermodynamik der gebundenen Zustände in Plasmen // Ann. Phys. (Leipzig). – 1967. – N 19. – p. 104–112.
53. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Т. 3 // М.: Физматлит, 2001.

54. Градштейн И. С., Рыжик И. М., Таблицы интегралов сумм, рядов и произведений / М.: Физматлит, 1963.
55. Froberg C.–E., Numerical Treatment of Coulomb Wave Functions // *Rev. Mod. Phys.* – 1955. – vol. 27. №4. – с. 399–411.
56. Stegun T., Abramowitz M., Generation of Coulomb Wave Functions by Means of Recurrence Relations // *Phys. Rev.* – 1955. – vol. 98. – с. 1851–1852.
57. S. G. Brush, H. L. Sahlin and E. Teller, Monte Carlo Study of a OneComponent Plasma. I // *J. of Chem. Phys.* – 1966. – N 45. – с. 2102.
58. E. L. Pollock, J. P. Hansen, Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One–Component Plasma // *Phys. Rev. A.* – 1973. – N 8. – с. 3110.
59. Dubin D. H. E., O’Neil T. M., Trapped nonneutral plasmas, liquids, and crystals (the thermal equilibrium states) // *Rev. Mod. Phys.* – 1999. – N 71. – с. 87.
60. P. N. Vorontsov–Velyaminov, A. M. Elyashevich, L. A. Morgenshtern, V. P. Chasovskikh, Investigation of phase transitions in Argon and coulomb gas by the Monte–Carlo method using an isothermically isobaric ensemble // *High Temperature.* – 1970. – vol. 8 N 2. – с. 261.
61. J. M. Caillol, D. Levesque, and J. J. Weis, A Monte Carlo finite size scaling study of charged hard-sphere criticality // *J. Chem. Phys.* – 1997. – N 107. – с. 1565.
62. C. Vega, J. L. E. Abascal, C. McBride, F. Bresme, The fluid–solid equilibrium for a charged hard sphere model revisited // *J. Chem. Phys.* – 2003. – N 119. – с. 964.
63. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, Физика неидеальной плазмы / М.: Физматлит, 2004.
64. Зеленер Б. В., Г. Э. Норман, В. С. Филинов // *ТВТ.* – 1972. – N 10. – с. 1160; *ТВТ.* – 1973. – N 11. – с. 922; *ТВТ.* – 1974. – N 12. – с. 267.

65. Зеленер Б. В. Об уравнении состояния неидеальной плазмы // ТВТ. – 1977. – N 15. – с. 893
66. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика / М.: Наука, 1964.
67. Kubo R. Thermodynamics / NHPC–Amsterdam, 1968, (гл. 4 задача 47, гл. 2 задача 34).
68. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, Термодинамика сильно неидеальной плазмы // ТВТ. – 1970. – N 8. – с. 413.
69. А. Л. Хомкин, Л. Г. Дьячков, А. С. Шумихин, Исследования неидеальной плазмы на страницах ТВТ за последние 50 лет (1963–2012). Библиографический обзор // ТВТ. – 2013. – т. 51 № 3. – с. 326.