

На правах рукописи

**Бутлицкий Михаил Анатольевич**

**ТЕРМОДИНАМИКА  
УЛЬТРАХОЛОДНОЙ РИДБЕРГОВСКОЙ ПЛАЗМЫ**

01.04.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника»

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Москва — 2015

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель: канд. физ.–мат. наук, зам. директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур РАН (г. Москва),  
**Зеленер Борис Вигдорович.**

Официальные оппоненты: д–р. физ.–мат. наук, профессор кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт–Петербургского государственного университета (г. Санкт–Петербург),  
**Воронцов–Вельяминов Павел Николаевич;**  
д–р. физ.–мат. наук, вед. науч. сотрудник  
Отдела низкотемпературной плазмы  
Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (г. Москва),  
**Баско Михаил Михайлович.**


Ведущая организация: Московский физико–технический институт (государственный университет), г. Москва.

Защита состоится \_\_\_\_\_ 2015 г. в 11 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединённого института высоких температур Российской академии наук по адресу: Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, экспозал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН. Отзывы на автореферат просьба присылать по адресу: 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, ОИВТ РАН.

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2015 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 002.110.02  
канд. физ.-мат. наук

  
М. М. Васильев

© ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, 2015

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

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.

В данной работе в качестве частично ионизованного ридберговского вещества (ридберговской плазмы) рассматривается система частиц, 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.

К изучению таких систем в последнее время проявляется большой интерес. Экспериментальные исследования 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 [2–6]), так и при ультранизких температурах в разреженных системах (в более поздних экспериментах американских исследователей [7–10]). 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. главу «Обзор литературы» диссертации). Также относительно новым и слабо изученным направлением физики можно считать физику плазмы в области сверхнизких температур (около абсолютного нуля) и высоких значений параметра неидеальности (отношение средней потенциальной энергии взаимодействия частиц к кинетической).

В настоящей работе исследуются классические и квантовые невырожденные (длины волны де–Бройля  $\lambda = h/mv$  меньше среднего межчастичного рас-

стояния), сильно неидеальные (средняя потенциальная энергия взаимодействия частиц больше средней кинетической энергии) ридберговские системы многих частиц. То есть ридберговская плазма, состоящая из атомов, находящихся в высоковозбужденных ридберговских (водородоподобных) состояниях, свободных электронов и ионов.

Диссертация посвящена разработке модифицированной псевдопотенциальной модели неидеальной ридберговской плазмы и анализу термодинамики модели двухкомпонентной полностью ионизованной плазмы «кулон с полочкой», а также расчету при помощи численного эксперимента различных термодинамических свойств этих модельных систем в широком диапазоне температур и плотностей, в том числе соответствующих экспериментальным [2–10]. Из наиболее интересных результатов работы можно выделить обнаруженный в модели «кулон с полочкой» и исследованный фазовый переход типа «газ–жидкость», обнаруженное формирование метастабильной кристаллоподобной структуры в ридберговской плазме.

### **Цель работы**

Целью настоящей работы является решение следующих 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 бинодали, спинодали и критической точки в рамках базовой модели неидеальной плазмы «кулон с полочкой».

Для достижения поставленных целей в работе *впервые* разработана модифицированная псевдопотенциальная модель, служащая для расчёта термодинамических свойств ридберговской плазмы, находящейся в полном (как в экспериментах [2–6]) и неполном термодинамическом равновесии [7–9]. В области параметров [7–9] проанализирована возможность расчета термодинамических свойств системы методами равновесной термодинамики.

### **Научная новизна работы**

Разработанная в работе модель основана на псевдопотенциальной модели невырожденной квантовой системы [11]. 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.

Нужно отметить, 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. Следует подчеркнуть, 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 [11], 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, обнаружена метастабильная область где возможно существование упорядоченной кристаллоподобной структуры.

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.

### **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Модифицированная псевдопотенциальная модель неидеальной ультрахолодной 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 неидеальной ультрахолодной ридберговской плазмы, полученные численно методом Монте–Карло в широкой области параметров, в том числе, соответствующих экспериментальным [2–6] и [7–10] (температура 1–1000 К, плотность частиц  $10^2$ – $10^{16}$  см<sup>-3</sup>, уровни возбуждения ридберговских атомов от 36 и выше, от 10 и выше плюс состояния непрерывного спектра).

3. Результаты численного расчета псевдопотенциалов электрон–ионного взаимодействия в области низких температур ( $< 100$  К) по водородным волновым функциям.
4. Результаты расчета термодинамических и структурных свойств базовой модели двух–компонентной плазмы «кулон с полочкой» в широкой области параметров: уравнения состояния, парные корреляционные функции, внутренние энергии и давление.
5. Обнаруженный фазовый переход типа «газ–жидкость» в модели «кулон с полочкой», и его свойства: кривые границы метастабильных состояний, фазового равновесия, параметры критической точки:

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

### **Апробация работы**

Результаты работы доложены и обсуждены на следующих конференциях и семинарах: «Научная сессия 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), семинары теор. отдела им. Л. М. Бибермана ОИВТ РАН.

### **Публикации**

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.

### **Практическая ценность 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 мо–

делях 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, построенные из первых принципов.

### **Личный вклад автора**

Все приведенные в диссертации результаты получены автором лично, кроме специально оговоренных случаев.

### **Объем и структура работы**

Диссертация состоит из пяти глав, заключения и списка литературы. Общий объём текста, включая 39 рисунков и две таблицы, составляет 109 страниц, процитировано 69 источников.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

*В первой главе* (введение) показана актуальность теоретического исследования ридберговской плазмы, формулируются задачи и цели диссертации, кратко перечисляются выбранные методы решения задач (расчет методом Монте–Карло псевдопотенциальной модели и модели «кулон с полочкой», численный расчет электрон–протонного взаимодействия), описана 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 [7–10], где обнаружено аномальное замедление рекомбинации и эксперименты в термоэмиссионных диодах [2–6], 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, 12, 13] к современным экспериментам [2–10] оказывается практически не применима, поскольку не учитывает температурные эффекты и рассматривает вырожденные электроны. Показано, что более поздние теоретические работы [14–20] в попытках объяснить результаты экспериментов предлагают прежде всего кинетические модели экспериментов, отчасти противоречащие друг другу.

*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 размера ридберговского атома).

Полученная в этой главе модифицированная псевдопотенциальная модель основана на псевдопотенциальной модели сильнонеидеальной плазмы [11] 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–протонного взаимодействия. Эти псевдопотенциалы используются для численного расчета термодинамики модифицированной псевдопотенциальной модели. Обнаружено, что точность квазиклассического расчета псевдопотенциала [11] тем лучше, чем ниже температура.

В классической статистической механике все термодинамические величины следуют из конфигурационного интеграла

$$Q_N = \int_V d^{(N)}\vec{q} e^{-\beta\Phi_N}, \quad (1)$$

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

В квантовой статистике это выражение заменяется на

$$Q_N = \int_V d^{(N)}\vec{q} S_N(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N, T), \quad (2)$$

где  $S_N$  — слэтеровская сумма:

$$S_N \sim \sum_n |\Psi_n(q_1, \dots, q_N)|^2 \exp[-\beta E_n(N)]. \quad (3)$$

$\Psi_n$ ,  $E_n(N)$  — волновые функции и собственные значения энергии для системы частиц. Суммирование проводится по полной совокупности ортонормированных волновых функций.

Для системы двух частиц:



$$S_2(r, T) \sim \sum_n |\Psi_n(r)|^2 \exp[-\beta E_n], \quad (4)$$

где  $\Psi_n$ ,  $E_n$  — волновые функции и собственные значения энергии двух частиц, взаимодействующих при помощи потенциала  $\Phi(r)$ . Суммирование в (4) проводится по всем состояниям дискретного и непрерывного спектра.

Если представить формально слэтеровскую сумму (4) в виде классической плотности вероятности, получим выражение для парного псевдопотенциала:

$$\Phi^*(r, T) = -kT \ln S_2(r, T). \quad (5)$$

По аналогии с классическими статистическими системами многих частиц, естественно рассмотреть, в нулевом приближении, физическую модель, в которой взаимодействие между каждыми двумя частицами описывается парным псевдопотенциалом  $\Phi^*(r, T)$ .

Слэтеровская сумма в этой модели запишется следующим образом:

$$S_N^0 = \prod_{i < j} S_2(r_{ij}) = \exp[-b \sum_{i < j} F^*(r_{ij}; T)]. \quad (6)$$

Слэтеровская сумма для взаимодействия двух электронов записывается в виде:

$$S_{ee}(r, T) = 16\pi^{3/2} \lambda_{ee}^3 \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(r, \sigma_1, \sigma_2)|^2 \exp(-\beta E_{\alpha}) \equiv \exp(-\beta \Phi_{ee}(r, T)) \quad (7)$$

где  $\lambda_{ee}$  — де-бройлевская длина волны электрона.

В рассматриваемой области параметров электрон–электронный псевдопотенциал отличается от кулоновского на расстояниях много меньше среднего межчастичного расстояния (показано в работе [21]). Ион–ионные псевдопотенциалы совпадают с законом Кулона. Необходимо только учесть конечность размеров иона (например, кристаллографический радиус).

Для системы электрон–протон:

$$S_{ep} = \left( \frac{2\pi\beta\hbar^2}{\mu} \right)^{3/2} \sum_n |\psi_n|^2 \exp(-\beta E_n), \quad \text{где } \mu = \frac{m_e m_p}{m_p + m_e}, \quad (8)$$

$m_e$  и  $m_p$  — масса электрона и протона соответственно.

При этом (8) можно представить в виде:

$$S_{ep}(r, T) = S_d + S_c, \quad (9)$$

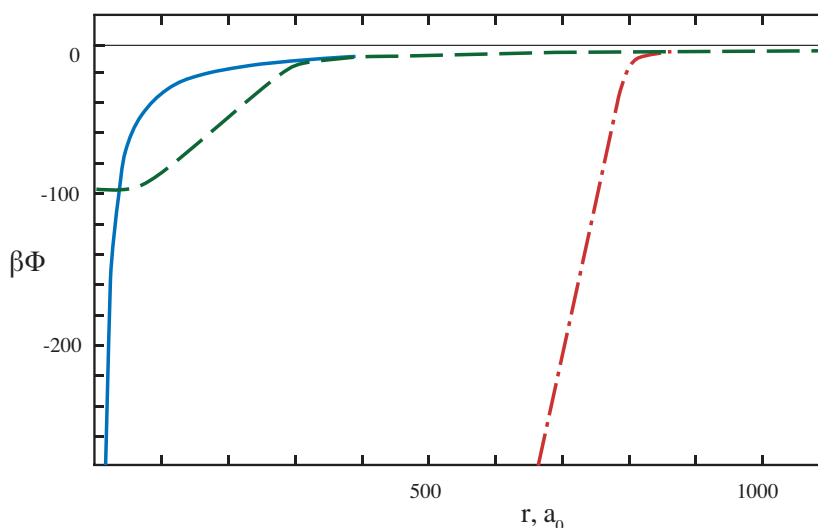
где  $S_d$  — сумма состояний дискретного спектра,  $S_c$  — сумма состояний непрерывного спектра.

Слэтеровские суммы  $S_d$  и  $S_c$  можно рассчитать точно, зная волновые функции системы электрон-протон для дискретного и непрерывного спектров. В псевдопотенциальной модели, которая рассматривается в настоящей работе, электрон-ионный псевдопотенциал рассчитывается с учетом только тех энергетических уровней, которые существуют в нерекombинировавшей плазме. Например, в условиях [7–9] существует только непрерывный спектр, а в условиях [10] — непрерывный спектр и дискретный от  $k \geq 36$  или  $k \geq 39$ . Также рассмотрен случай, соответствующий  $k \geq 10$ .

Использовались два способа расчета слэтеровских сумм: когда несколько первых уровней дискретного спектра рассчитываются точно по волновым функциям, а вклад остальной части спектра по приближенным формулам в квазиклассическом приближении [11], и второй способ — точный численный счет по водородным волновым функциям дискретного и непрерывного спектров. Последний вид расчета аналогичен проделанному для водородной плазмы в [21], однако осуществлен впервые для температур  $< 100$  К.

Расчёты слэтеровских сумм проводились для различных температур в диапазоне от 3 до 100 К и с учетом вкладов различного числа уровней дискретного спектра.

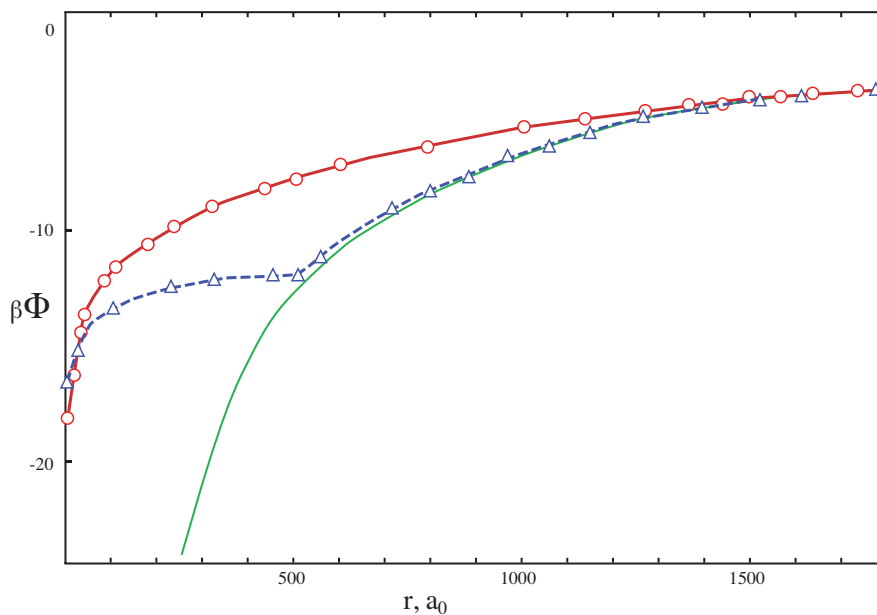
Для наглядности на рис. 1 приведены графики электрон-ионных псевдопотенциалов, в которых учтены разные части дискретного спектра, и график классического кулоновского потенциала.



**Рис. 1.**  $T = 100$  К:

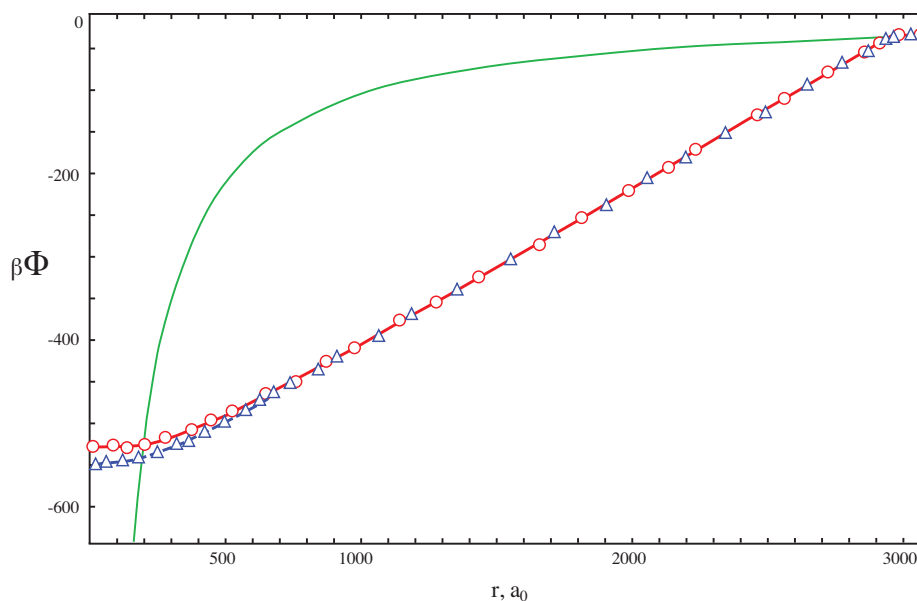
*пунктир* — псевдопотенциал, где вклад дискретного спектра учтен с 5-го уровня;  
*сплошная линия* — кулоновский потенциал; *штрих-пунктир* — псевдопотенциал,  
 где вклад дискретного спектра учтен с 1-го уровня

В третьей главе диссертации так же было показано, что квазиклассический подход к расчёту матрицы плотности взаимодействия даёт тем более точный результат, чем ниже температура, что показано на рис. 2 и 3.



**Рис. 2.**  $T = 50$  К:

вклад дискретного спектра учтен с 17 уровня; *кружочки* — псевдопотенциал; *сплошная линия* — кулоновский потенциал; *треугольники* — псевдопотенциал, рассчитанный в квазиклассическом приближении



**Рис. 3.**  $T = 3$  К:

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

В этой же главе приведена оценка времени релаксации электрон-ионной температуры и на базе нее обоснована правомерность расчета термодинамики ридберговской плазмы в неполном термодинамическом равновесии. В [18] показано, что процесс рекомбинации в условиях [7–10] идет значительно медлен-

нее ( $\sim 10^{-4}$  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 тоже время, отсутствует равновесная заселенность электронов по энергетическим уровням. Надо добавить, что в эксперименте [7–9] также получается замедление рекомбинации, а разлет плазмы начинается при  $t > 10^{-5}$  с.

*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. На этих диаграммах представлены обнаруженные при расчетах 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 наличии фазового перехода типа газ–жидкость в этой модели.

При псевдопотенциальном 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 [11]. Определение различных термодинамических величин при этом сводится к вычислению средних значений от известных функций координат. Границы применимости псевдопотенциальной модели подробно рассмотрены в работе [11]. В случае условий рассматриваемых экспериментов (низкая температуры, низкая плотность и отсутствие вырождения электронов) модель справедлива в области  $\gamma \geq 1$ , из-за отсутствия как парных, так и много–частичных связанных состояний.

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

Например, для энергии:

$$\bar{E} = Q^{-1}(N, V, T) \int_V \dots \int_V E_N(q) S_N(a, T) d^N q, \quad (10)$$

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

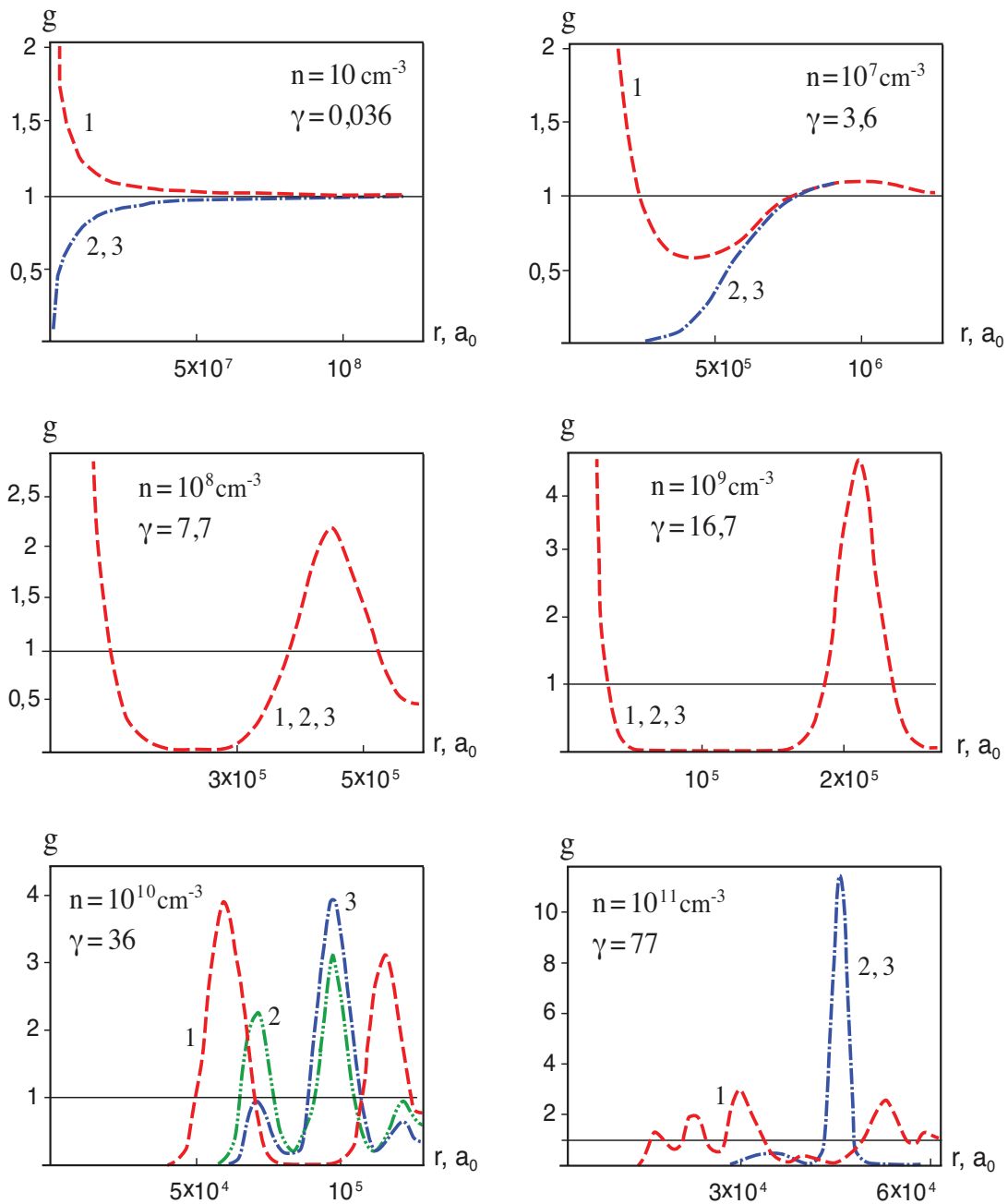
Расчеты проводились в  $NVT$  ансамбле одинакового количества электронов и ионов с периодическими граничными условиями. Характерные длины цепей Маркова, использованные в расчетах составляли несколько миллионов шагов. При числе частиц в ящике от 200 до нескольких тысяч. Взаимодействие в системе задавалось псевдопотенциалами, причем для взаимодействия одноименно заряженных частиц использовался кулоновский потенциал: ввиду больших значений средних расстояний вклад за счет поправок к кулоновскому потенциалу на малых расстояниях оказывался несущественен.

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.

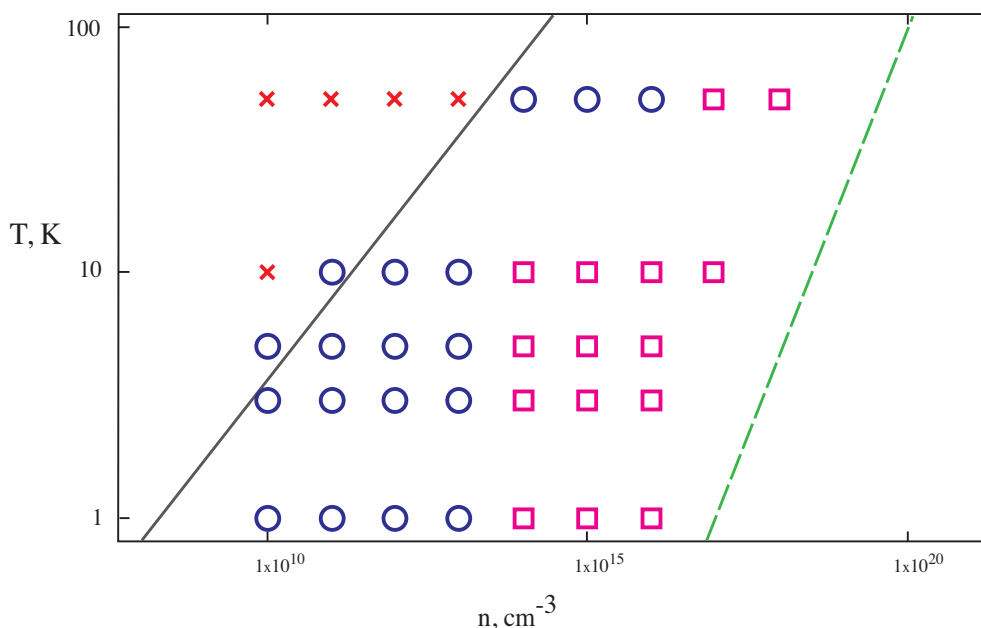
Были проведены расчеты для температур  $T = 1–100$  К и области концентраций  $n_i = n_e = 10^5–10^{15}$  при учете в псевдопотенциале  $S_{ei}$  уровней энергии атома с 36 и 10 уровней. В случае  $\gamma \ll 1$  наблюдается хорошее согласие корреляционных функций с приближением Дебая–Хюккеля [22]. При  $\gamma \geq 1$  корреляционные функции указывают на образование ближнего порядка среди частиц, как одного, так и разных знаков. При росте  $\gamma$  этот порядок усиливается. Максимумы корреляционных функций растут, а минимумы обращаются в 0 (см. рис. 4). Эта динамика изменения парных корреляционных функций системы качественно повторяется и для других псевдопотенциалов, других областей температур.

На рис. 5 и 6 приведены  $n$ – $T$  диаграммы всех основных расчетных точек численных экспериментов. Отмечены области отсутствия порядка (газо–подобные), ближнего порядка (жидко–подобные) и дальнего порядка (кристаллоподобные). Это изменение структуры с ростом параметра неидеальности также универсально для разных исследованных псевдопотенциалов, что дает основание предполагать наличие фазовых переходов первого рода в этой модели и даже оценить область возможного фазового перехода.

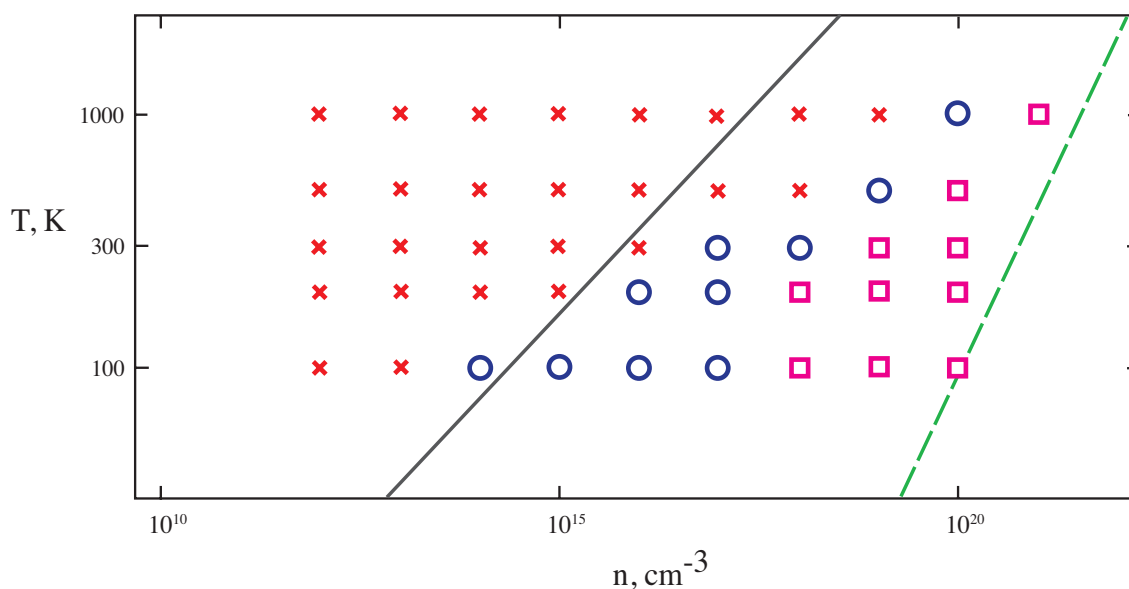
Другим интересным результатом четвертой главы диссертации можно считать обнаруженные области дальнего порядка, где средняя удельная потенциальная энергия взаимодействия в системе отрицательна. Это позволяет предположить существование метастабильной кристалло–подобной структуры ридберговских атомов в условиях экспериментов [2–10].



**Рис. 4.** Корреляционные функции при различных плотностях ( $T = 0.1 \text{ K}$ ):  
 1 — электрон–ионная  $g_{ei}(r)$ ; 2 — электрон–электронная  $g_{ee}(r)$ , 3 — ион–ионная  $g_{ii}(r)$ .  
 В электрон–ионном псевдопотенциале учтен вклад только непрерывного спектра



**Рис. 5.** 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 —  $n\lambda^3 = 1$



**Рис. 6.**  $n$ - $T$  диаграмма с учетом дискретного спектра с 10-го уровня: сплошная линия — ( $\gamma = 1$ ); пунктирная — вырождение ( $n\gamma^3 = 1$ ); крестики соответствуют газоподобному состоянию (дебаевская плазма); окружности — жидкости (ближний порядок); квадраты — решётке (дальному порядку)

*В пятой главе* исследована фазовая диаграмма с целью определения границ фазового равновесия в рамках наиболее простой базовой модели двухкомпонентной плазмы «кулон с полочкой». Эта модель была предложена впервые в [24] как базовая модель для расчета равновесных свойств двухкомпонентной низкотемпературной плазмы. Однако подробное исследование термодинамики самой модели в широком диапазоне параметров сделано впервые в диссертации

ции. Методом Монте–Карло рассчитаны корреляционные свойства, уравнение состояния.

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

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 [2–6] и [7–10], 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 модели «кулон с полочкой» [23] 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.

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

В пятой главе диссертации показано также, что для данной модели справедливо соотношение теоремы вириала:



$$P/nk_B T = 1 + E/3Nk_B T.$$

В связи с тем, что для данного  $\varepsilon$  все термодинамические функции зависят только от  $\gamma$ , 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  $T^* = \varepsilon^{-1}$ .

Расчеты термодинамических и корреляционных функций проводились классическим методом Монте–Карло (с использованием алгоритма Метрополиса) в  $NVT$  ансамбле [25], состоящем 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  $\gamma$  менялся от 0.01 до 100, а  $\varepsilon$  от 2 до 1000. Выбор таких  $n$  и  $T$  обусловлен необходимостью устойчивости расчетов при большом изменении  $\gamma$  и  $\varepsilon$ . 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.

По рассчитанным в численном эксперименте значениям удельной внутренней энергии определялись (с помощью теоремы вириала) графики зависимости давления от безразмерного удельного объема, эти графики аппроксимировались полиномами по степеням  $\gamma$  для разных полочек  $\varepsilon$ .

По этим графикам сперва была согласно [26] получена граница метастабильных состояний фазового перехода газ–жидкость (спинодаль), и затем вершина этой кривой — критическая точка:

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

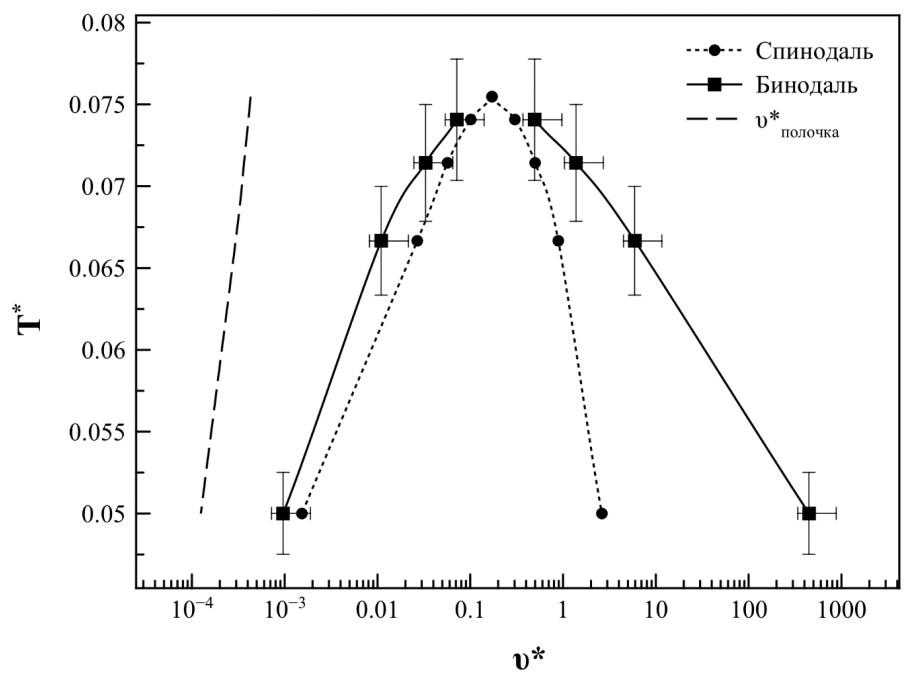
Аппроксимационные выражения для  $P^*(v^*)$  также использовались для расчета бинодали — кривой, ограничивающей двухфазную область.

На рис. 7 показаны результаты расчетов крит. точки и бинодали в приведенных переменных.

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. 8 приведены парные корреляционные функции для изотермы вблизи газовой и жидкой ветви кривой равновесия.

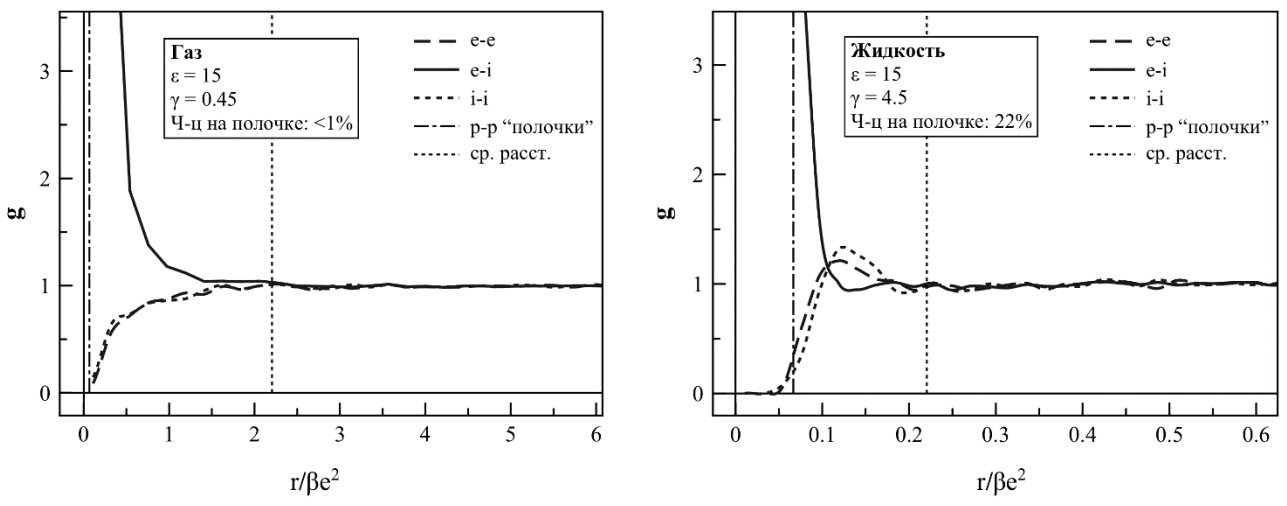
На рисунках приведены также значения среднего расстояния  $r_{cp.} = \sqrt[3]{v^*}$  и размера «полочки» равного  $\varepsilon^{-1}$ . Стоит отметить, что максимум корреляционной функции электрон–ион находится вне пределов полочки как в газовой, так и в жидкой фазе. Это может означать, что в образовании 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. 7.** Графики бинодали и спинодали:

пунктиром отмечен объем, определяемый геометрическим размером полочки  $v^*_{\text{полочка}} = 1/\varepsilon^3$



**Рис. 8.** Парные корреляционные функции для  $T^* = 1/15$ :

в приведенных координатах (расстояние нормировано на длину Ландау  $\beta\varepsilon^2$ ). Отмечена доля  $e-i$  пар, находящихся на расстоянии меньше размера полочки

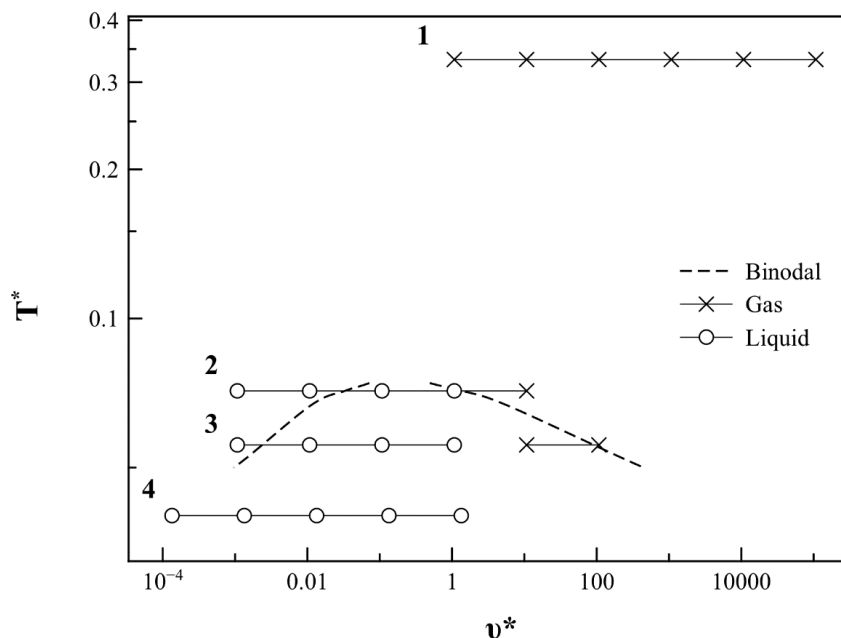
*В заключении диссертации* показано, что если в модели «кулон с полочкой» сделать псевдопотенциал независимым от температуры:

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

То для такой модели термодинамические функции также будут зависеть от безразмерных параметров  $\beta\varepsilon^*$  и  $\gamma$ , но не будет выполняться соотношение

теоремы вириала. 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 в исходной модели. Роль приведенной температуры в этом случае будет играть значение  $(\beta\varepsilon^*)^{-1}$ . Для этого варианта модели положение критической точки для заданного  $\varepsilon^*$  будет зависеть от температуры  $T$  и наоборот.

В работе наглядно показано соответствие фазовой диаграммы модели «кулон с полочкой» и модифицированной псевдопотенциальной модели ридберговской плазмы. Это сделано путем сравнения расчетных точек  $n$ – $T$  диаграмм (см. рис. 5, 6) и бинодали соответствующих потенциалов «кулона с полочкой» (рис. 9).



**Рис. 9.** Точки фазовых диаграмм рис. 5 и 6 в координатах бинодали для модифицированной псевдопотенциальной модели «кулон с полочкой»:

1 — псевдопотенциал с учетом уровней, начиная с 10-го при 1000 К; 2 — то же, начиная с 36-го уровня при 10 К; 3 — то же, начиная с 10-го уровня при 100 К; 4 — то же, начиная с 36-го уровня при 5 К

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».

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Модифицированная псевдопотенциальная модель неидеальной ридберговской плазмы, состоящей из свободных электронов, ионов и водородоподобных ато-

мов, у которых реализуется только часть возможных высоковозбужденных состояний. В этой модели исследована область температур 1–1000 К, и концентраций  $10^2$ – $10^{16}$  см<sup>-3</sup>.

2. Псевдопотенциалы электрон–ионного взаимодействия, рассчитанные по водородным волновым функциям в области низких температур ( $< 100$  К).
3. Показано (на основе сравнения результатов численного расчета по волновым функциям с результатами квазиклассического приближения [11]), 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 ([2–6] и [7–10]).
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). 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 [10], 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  $\gamma \geq 1$ .
6. Термодинамические свойства модели «кулон с полочкой» [23], 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:

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

### **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:**

В список включены только работы в реферируемых научных журналах из списка ВАК, полный перечень, включая тезисы конференций и пр. предоставляется по запросу (email: aristofun@yandex.ru).

1. *Butlitsky M.A., Fortov V.E., Manykin E.A., Zelener B.B., Zelener B.V.* Thermodynamics of nonideal Rydberg plasma created by dye laser // *Laser Physics*. – 2005. – Vol. 15. N 2. – С. 256.
2. *Бутлицкий М.А., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А.* Двухчастичная матрица плотности и псевдопотенциал электрон–протонного взаимодействия для ультранизких температур // *Жур. выч. мат. и мат. физ.* – 2008. – Т. 48. №1. – С. 154–158.
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 физика и инжиниринг*. – 2012. – Т. 3. №2. – С. 151.
4. *Butlitsky M. A., Zelener B. B., Zelener B. V.* Critical point of gas–liquid type phase transition and phase equilibrium functions in developed two–component plasma model // *J. Chem. Phys.* – 2014. –N 141. – P. 024511.
5. *Бутлицкий М. А., Зеленер Б. Б., Зеленер Б. В.* К вопросу о кулоновском фазовом переходе // *ТВТ*. — 2015. — Т. 53 № 2. — С. 163–168.

#### СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ В АВТОРЕФЕРАТЕ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П.* О коллективном электронном состоянии в системе сильновозбужденных атомов // *ДАН СССР*. – 1981. – N 260. – С. 1096.
2. *Манькин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П.* Теория конденсированного состояния в системе возбужденных атомов // *ЖЭТФ*. – 1983. – N 84. – С. 442.
3. *Aman C., Pettersson J. B. C., Holmlid L.* Field ionizable cesium metal clusters from a foil diffusion source // *Chem. Phys.* – 1990. – N 147. – P. 189–197.
4. *Svensson R. S., Holmlid L., Lundgren L.* Semi-conducting low pressure, low temperature plasma of cesium with unidirectional conduction // *J. Appl. Phys.* – 1991. – N 70. – P. 1489–1492.
5. *Aman C., Pettersson J. B. C., Lindroth H., Holmlid L.* Visible luminescence from particles on surfaces: Evidence of de-excitation of Rydberg matter // *J. Matter Res.* – 1992. – N 7. – P. 100–104.
6. *Svenson R., Holmlid L.* Electronic Raman processes in Rydberg Matter of Cs: circular Rydberg states in Cs and Cs<sup>+</sup> // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – N 83. – P. 1739–1742.
7. *Killian T. C., Kulin S., Bergeson S. D. et al,* Creation of an ultracold neutral plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – vol. 83 N 23. – P. 4776.
8. *Kulin S., Killian T. C., Bergeson S. D. and Rolston S. L.* Plasma Oscillations and Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – vol. 85. N 2. – P. 318.
9. *Killian T. C., Lim M. J., Kulin S. et al,* Formation of Rydberg Atoms in an Expanding Ultracold Neutral Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – vol. 86 N 17. – P. 3759.
10. *Robinson M. P., Tolra B. L., Noel M. W. et al,* Spontaneous Evolution of Rydberg Atoms into an Ultracold Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 85 N 21. – P. 4466.
11. *Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С.* Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. – М.: Наука, 1981.

12. Манькин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. Конденсированные состояния возбужденных атомов цезия // ЖЭТФ. – 1992. – N 102. – С. 804.
13. Манькин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. [Текст] // Химическая физика. – 1999. – т. 18 N 7. – С. 88.
14. *Murillo M. S.* Using Fermi Statistics to Create Strongly Coupled Ion Plasmas in Atom Traps // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – N 87. – P. 11.
15. *Kuzmin S. G., O’Neil T. M.* Numerical Simulation of Ultracold Plasmas: How Rapid Intrinsic Heating Limits the Development of Correlation // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – N 88. – P. 065003.
16. *Robicheaux F., Hanson J. D.* Simulation of the Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – N 88. – P. 055002.
17. *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. – P. 033416.
18. Зеленер Б. Б., Зеленер Б. В., Манькин Э. А. Кинетические процессы в неидеальной ридберговской материи // ЖЭТФ. – 2004. – т. 126 N 6. – С. 1344.
19. *Hahn Y.* Relaxation of cold plasmas and threshold lowering effect // *Phys. Rev. E.* – 2001. – N 64. – P. 046409.
20. *Hahn Y.* Polarizability of Rydberg atoms and the dominant long-range interactions // *Phys. Rev. A.* – 2000. – N 62. – P. 042703.
21. *Barker A. A.* Effective Potentials between the Components of a Hydrogeneous Plasma // *J. Chem. Phys.* – 1971. – vol. 55 N 4. – P. 1751.
22. *Debye P., Hückel E.* The theory of electrolytes. I. Lowering of freezing point and related phenomena // *Physikalische Zeitschrift.* – 1923. – N 24. – P. 185–206.
23. Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. [Текст] // ТВТ. – 1972. – N 10. – с. 1160; ТВТ. – 1973. – N 11. – с. 922; ТВТ. – 1974. – N 12. – С. 267.
24. *Zelener B. V., Norman G. E., Filinov V. S.* Pseudopotential model of a nonideal plasma // *High Temperature Science.* – 1976. – vol. 13 N 4. – P. 650–658.
25. Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте–Карло в статистической термодинамике. – М.: Наука, 1977.
26. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1964.

**Бутлицкий Михаил Анатольевич**

**ТЕРМОДИНАМИКА  
УЛЬТРАХОЛОДНОЙ РИДБЕРГОВСКОЙ ПЛАЗМЫ**

Автореферат

Подписано в печать		Формат 60x84/16
Печать офсетная	Уч.-изд.л.	Усл.-печ.л.
Тираж 100 экз.	Заказ	Бесплатно

ОИВТ РАН. 125412, Москва, Ижорская ул., 13, стр. 2

