

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМ. М.В. КЕЛДЫША

А. А. Белов, Н. Н. Калиткин

МОДЕЛЬ КВАЗИНЕЗАВИСИМЫХ ЧАСТИЦ
ДЛЯ НЕОДНОРОДНОГО ПЛАЗМЕННОГО
МИКРОПОЛЯ

Москва, 2019

А. А. Белов, Н. Н. Калиткин. Модель квазинезависимых частиц для неоднородного плазменного микрополя

Оптические свойства плазмы определяются наличием в ней флуктуирующего микроскопического электрического поля. В работе дан критический анализ современных моделей микрополя и показаны их недостатки. Для преодоления этих недостатков взята модель QUIP (QUasi-Independent Particles), полученная из первых принципов. Построено ее обобщение, позволяющее учитывать неоднородность микрополя по октупольный член включительно. Исследована сходимость ряда по мультиполям, и показано, что членами более высоких порядков можно пренебречь. Проведена апробация модели путем сравнения с экспериментами. Отмечено, что сравнение следует проводить по числу наблюдаемых линий в спектральных сериях, поскольку это число сильно зависит от принятой модели. Выбраны эксперименты, наиболее подходящие для такой проверки. Это эксперименты по свечению плазмы Ar+Kr, нагретой лазерным излучением, в которых видна полностью спектральная серия иона Ar^{+16} . Показано, что обобщенная модель QUIP правильно описывает наблюдаемое число линий этой серии, что подтверждает ее адекватность.

Ключевые слова: плазма, микрополе, эффект Штарка

A. A. Belov, N. N. Kalitkin. Quasi-Independent Particles Model for Heterogeneous Plasma Microfield

Optical properties of plasmas are determined by presence of fluctuating microscopic electric field. The present work provides thorough analysis of contemporary models and points out their shortcomings. To overcome the latter, we take the QUIP (QUasi-Independent Particles) model derived ab initio. We provide generalization of the model allowing to account for microfield heterogeneity up to octupole term. We investigate convergence of the multipole series and show that higher order terms can be neglected. We perform verification of the model via comparison with experiments. We emphasize that the comparison should be made with respect to the number of observed lines because this number strongly depends on the selected model. We outline experiments suitable for such testing. These are the experiments on Ar+Kr radiating plasma heated by laser radiation. In these experiments, the entire Ar^{+16} spectral series is observed. The QUIP model correctly describes the number of observed lines of the series, so its adequateness is justified.

Keywords: plasma, microfield, the Stark effect

1 Модели микрополя

Проблема

Моделирование актуальных задач воздействия лазерного излучения на вещество и расчеты лазерных мишеней управляемого термоядерного синтеза проводят по программам радиационной газодинамики. Важными входными данными этих программ являются коэффициенты поглощения света в плазме. Значительная доля величины этих коэффициентов обусловлена процессом поглощения в оптических линиях и фотоэффектом. Оба эти процесса зависят от так называемого микрополя. Это электрическое поле внутри плазмы, порожденное хаотическим тепловым движением зарядов – ионных остовов и свободных электронов. Это поле флуктуирует во времени и пространстве. Знание характеристик такого поля важно для решения многих научно-технических задач.

Взаимодействие зарядов в плазме является кулоновским. Сила взаимодействия двух зарядов равна $Z_1 Z_2 / r^2$. Это приводит к принципиальной трудности теоретического рассмотрения таких систем. Приведем наглядное пояснение. Пусть заряды равномерно распределены в пространстве. Возьмем вокруг заряда Z_1 концентрические сферические слои толщины dr . Количество частиц в слое пропорционально объему слоя $4\pi r^2 dr$. Значит, каждый такой слой действует на заряд Z_1 с одинаковой силой. Суммирование таких сил по всему пространству дает расходящийся интеграл.

До сих пор для кулоновских систем не найдено математически строгих методов исследования. Существуют лишь более или менее удачные модели. При этом для исследования каждого свойства зачастую приходится подбирать свою модель, причем совокупность таких моделей может оказаться противоречивой.

Метод Фурье-образа

Изучение микрополя начал Хольцмарк [1]. Он использовал интегральное преобразование Фурье. Поскольку для кулоновских систем точных методов не разработано, Хольцмарк строил Фурье-образ на основе модельных соображений и по этому приближенному Фурье-образу обратным интегральным преобразованием Фурье восстанавливал функцию распределения. Она получалась в виде интеграла, не берущегося в элементарных функциях. Распределение Хольцмарка приведено на рис. 1, где для напряженности E выбран характерный масштаб $\langle Z \rangle / R^2$; здесь $\langle Z \rangle$ – усредненный заряд всех сортов частиц, R – радиус сферизованной атомной ячейки.

Позднее было опубликовано много работ по усовершенствованию модели Хольцмарка. В подавляющем большинстве из них также использовался интеграл Фурье, но с другими приближениями при построении Фурье-образа. Подробный обзор этих работ дан в [2]. Перечислим эти модели,

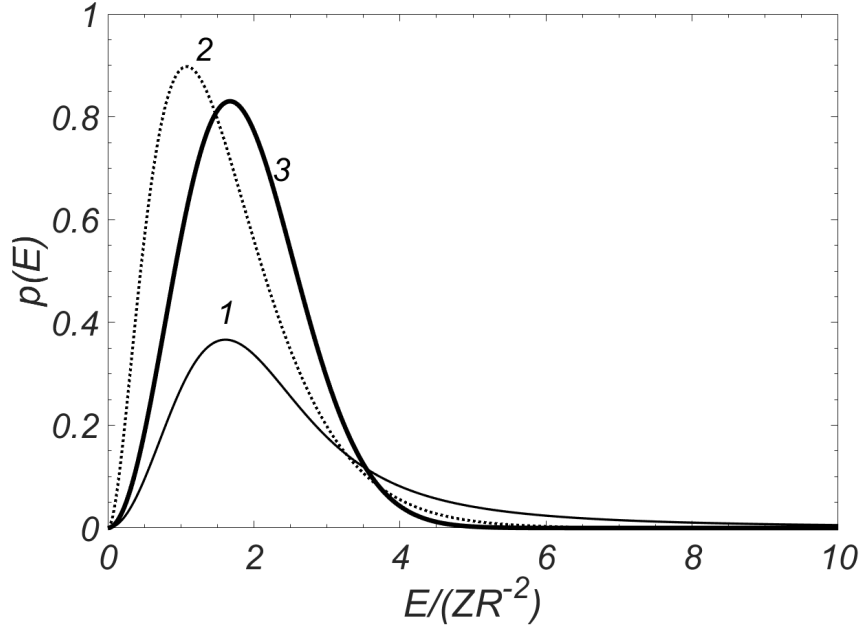


Рис. 1: Функции распределения микрополя; 1 – по Хольцмарку, 2 – модель SHO, 3 – модель QUIP.

отсылая за подробностями к оригинальным работам или обзору [2].

В модели Эккера и Мюллера [3], [4] вместо кулоновского потенциала использовался дебаевский. Беренгер и Мозер [5], [6] использовали цепочку уравнений Боголюбова, дебаевский потенциал и метод кластерного разложения. Хупер [7] – [9] развивал сходные подходы, но радиус дебаевской экранировки использовал как подгоночный параметр. Иглесиас усложнил модель Хупера, вводя факторы с дополнительными свободными параметрами, подгоняемыми под экспериментальные данные [10] – [14]. Модели такого же типа развивал Голосной [15], [16]. Неоднородность микрополя в рамках того же круга идей учитывалась в работах Чандрасекара и фон Ноймана [17] – [19], Кудрина [20], Шолина [21], Демурь [22] – [29].

Напомним, что перечисленные выше работы основаны на интегральном преобразовании Фурье. Однако в 1960-е годы Тихонов и его ученики показали [30], что интегральное преобразование Фурье является некорректной математической операцией. Это проявляется в том, что незначительное искажение Фурье-образа может привести к большим искажениям распределения, восстановленного обратным преобразованием Фурье. Поэтому результат оказывается сильно чувствительным к модельным предположениям, использованным при построении Фурье-образа. Покажем, что все описанные модели приводят к серьезному физическому дефекту.

В самом деле, у всех этих моделей распределение $p(E)$ при $E \rightarrow \infty$ имеет медленно убывающую асимптотику $p(E) \sim E^{-5/2}$. Но электрическое поле напряженности E имеет плотность энергии $E^2/(8\pi)$. Поэтому

усредненная по распределению плотность энергии

$$\frac{1}{8\pi} \int_0^\infty E^2 p(E) dE \quad (1)$$

оказывается бесконечной: интеграл расходится на верхнем пределе! Это показывает, что асимптотика перечисленных распределений является физически абсурдной, и этими распределениями можно пользоваться лишь в районе максимума $p(E)$.

Отметим, что в оригинальных работах указанная трудность не обсуждалась. По-видимому, она вообще не была замечена, хотя этот дефект модели столь же нефизичен, как нарушение закона сохранения энергии.

Метод коллективных координат

Несколько особняком стоят другие методы, упомянутые в обзоре [2]. Рассмотрим их.

На основе метода коллективных координат [31], [32] была построена модель простых гармонических осцилляторов [33], [34]. В ней функция распределения гауссова, так что плотность энергии является конечной. Это распределение приведено на рис. 1. Однако функция распределения сильно зависит от температуры T , причем эта зависимость нефизична: при $T \rightarrow 0$ максимум распределения неограниченно смещается вправо. Поэтому непонятно, какова фактическая область применимости данной модели.

Метод функционала плотности

Делались попытки применять к проблеме микрополя метод функционала плотности [35] – [44]. Этот метод считают построенным из первых принципов. Его основой является теорема Кона и Хоэнберга о том, что существует некоторый функционал от электронной плотности, который достигает своего минимального значения, если в него подставить точную электронную плотность основного состояния. Однако неизвестно, как найти данный функционал. Поэтому на практике вместо функционала от электронной плотности используют функционал от комбинации одноэлектронных волновых функций. Для такого функционала указанная теорема не имеет силы. Вдобавок, в модель обычно вводят подгоночные параметры. Поэтому метод фактически перестает быть первопринципным. В результате распределения микрополя, построенные в работах [35], [36], имеют степенные асимптотики [2], то есть также приводят к бесконечной плотности энергии поля. Поэтому к методу функционала плотности следует относиться с осторожностью.

Метод Монте-Карло

Первопринципными являются методы Монте-Карло, в том числе методы молекулярной динамики [45] – [53]. По ним выполняют расчеты, кото-

рые используют для апробации описанных выше моделей. Однако практическая реализация этих методов имеет ряд слабых мест.

Во-первых, используется число частиц ~ 1000 . Они занимают объем ~ 10 межатомных расстояний. Влияние частиц за пределами указанного объема учитывают с помощью некоторых граничных условий (чаще всего периодических). Для незаряженных частиц с быстро убывающим потенциалом взаимодействия это может быть удовлетворительным. Но для дальнедействующего кулоновского взаимодействия чувствительность результатов к выбору граничных условий оказывается большой.

Во-вторых, электроны имеют гораздо меньшую массу и гораздо большие скорости, чем ионы. Поэтому для расчета их динамики приходится выбирать очень малый шаг интегрирования по времени. Сама система дифференциальных уравнений динамики является плохо обусловленной, то есть фактически некорректной (см. [30]). Результат вычислений сильно зависит от начальных положений и скоростей частиц. При этом чем дольше ведется расчет, тем сильнее сказывается этот эффект.

Поэтому функция распределения вычисляется с невысокой точностью. Ее можно удовлетворительно определить в районе максимума, но практически невозможно найти асимптотики, на которые следует обращать особое внимание.

Модель QUIP

Качественно другой подход предложен Калиткиным и Козлиным в [54] – [56] (эти работы не рассматривались в обзоре [2]). Этот подход получил название QUIP – QUasi-Independent Particles. В нем использовался первый принцип – закон больших чисел. Из него следует, что компоненты напряженности микрополя имеют гауссово распределение, а длина вектора напряженности микрополя – максвелловское распределение. Последнее приведено на рис. 1. Положение максимума близко к таковому у распределения Хольцмарка. Однако функция распределения при $E \rightarrow \infty$ убывает не по степенному закону, а по экспоненциальному, то есть несоизмеримо быстрее. Поэтому все моменты указанных распределений, включая плотность энергии поля, становятся конечными.

Отметим, что в модели QUIP все формулы расчета распределений очень просты, так что она удобна для использования. Все остальные современные модели требуют громоздких численных расчетов, и только авторы этих моделей фактически могут ими пользоваться. Это отмечалось в обзоре [2].

Поэтому модель QUIP нам представляется наиболее перспективной. Данная работа посвящена дальнейшему ее развитию.

Опровержению закона больших чисел посвящена недавняя работа Зайда и Музино [57]. В ней рассматривается система неограниченного числа частиц, взаимодействующих по степенному закону, и утверждается, что по-

лучены аналитические выражения для функции распределения, которые отличаются от гауссовых. Авторы объясняют отклонение тем, что гауссово распределение получено в предположении о конечности вариации. Однако сами они обрезают потенциал взаимодействия как на малых, так и на больших расстояниях. Тем самым вариация оказывается конечной. И это противоречие фактически опровергает выводы работы [57]. Кроме того, результат зависит от величины этого обрезания. Такой произвол также ставит под сомнение результаты этой работы.

Косвенным доказательством нефизичности служит пример, где взаимодействие диполей на больших расстояниях возрастает пропорционально расстоянию. Это скорее напоминает закон Гука, связанный с применением внешних сил, а для точечных частиц такое взаимодействие в природе не встречается. Таким образом, работу [57] нельзя считать опровержением закона больших чисел.

2 Мультипольное разложение микрополя

Уточнение модели QUIP

Для описания микрополя из первых принципов была предложена модель квазинезависимых частиц. В ней предполагалось, что температуры достаточно высоки, так что кинетическая энергия заряженных частиц существенно превосходит потенциальную энергию их взаимодействия. Поэтому корреляции взаимного расположения движущихся зарядов не учитывались, и распределение частиц по объему считалось равномерным. Микрополе определялось как сумма полей огромного числа независимых частиц. Эта гипотеза позволяла применить закон больших чисел.

Однако равномерность распределения по пространству – слишком жесткая гипотеза. Критически проанализируем принятые предположения и ослабим ограничения модели, не нарушая условия применимости закона больших чисел.

Во-первых, примем точку, в которой хотим определить микрополе, за начало координат. В литературе различают случаи, когда в этой точке помещен пробный заряд и когда он отсутствует. При таком подходе функция распределения будет зависеть от величины пробного заряда. Однако такой подход неправилен.

В самом деле, функции распределения есть некоторое усреднение мгновенных значений поля по времени. Но все частицы движутся. Если в начальный момент времени пробный заряд находился в начале координат, то в последующий момент он сместится из этого положения. Чтобы найти поле около данного заряда, нужно переходить в систему координат, связанную с этим зарядом. Но заряд движется с ускорением, поэтому система

координат будет неинерциальной. Кроме того, вслед за движением частицы нужно соответственно менять границы объема. До сих пор никто таких расчетов не проводил. Поэтому следует строить универсальную функцию распределения, не зависящую от наличия или отсутствия пробного заряда.

Во-вторых, мы рассматриваем равновесную плазму в отсутствие внешних полей. Тогда распределение частиц по углам, несомненно, является в среднем изотропным.

В-третьих, заметим, что изотропность отнюдь не означает однородность распределения частиц. При однородности были бы возможны сколь угодно близкие положения любой пары частиц. Однако это не так. Положительные ионы (которые можно считать классическими частицами) не могут сильно сближаться из-за кулоновского отталкивания. Для электронов нужно учитывать квантовый эффект – дебройлевскую длину волны электрона. Поэтому электроны могут сближаться с ионами лишь на расстояния порядка дебройлевской длины волны. Это отличается от первоначальных требований модели QUIP.

Характерные величины сближений зависят от сорта частиц. Однако далее мы принимаем модельную гипотезу о том, что эти расстояния можно считать одинаковыми для любых сортов частиц. Фактически это единственное модельное предположение, которое мы пока делаем. Вероятность сильных сближений достаточно мала. Поэтому существуют все моменты скалярного радиуса r^{-n} . Сохраним за этой модификацией старое название модели QUIP. Рассмотрим построение законов распределения неоднородного микрополя на основе принятой модели [58].

Компоненты мультиполей

Точку, в которой ищем поле, выберем за начало координат. Будем пока рассматривать не сорта частиц с одинаковыми зарядами и некоторыми средними концентрациями, а индивидуальные частицы с зарядами Z_j и мгновенными положениями \mathbf{r}_j . Этими частицами являются ионы ($Z_j \geq 1$) и электроны ($Z_j = -1$); все величины берутся в атомной системе единиц. Плазма электронейтральна, так что

$$\sum_j Z_j = 0. \quad (2)$$

Нам нужны характеристики поля в точке \mathbf{r} вблизи начала координат. Каждый заряд создает в этой точке потенциал $\Phi_j = Z_j/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|$. Полный потенциал равен

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|}. \quad (3)$$

Разложим этот потенциал по \mathbf{r} , ограничиваясь кубическими членами

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi + \mathbf{E}\mathbf{r} + \frac{1}{2}U\mathbf{r}\mathbf{r} + \frac{1}{6}W\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots \quad (4)$$

Здесь скаляр Φ , вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} , квадрупольная матрица U и октупольный тензор третьего ранга W равны

$$\Phi = \Phi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=0}, \quad \mathbf{E} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}=0}, \quad U = \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} \Big|_{\mathbf{r}=0}, \quad W = \frac{\partial^3 \Phi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^3} \Big|_{\mathbf{r}=0}. \quad (5)$$

Их нахождение сводится к дифференцированию суммы из формулы (3). Для этого нужно продифференцировать каждый член суммы по \mathbf{r} и затем положить $\mathbf{r} = 0$. Нетрудно заметить, что $\partial/\partial \mathbf{r} = -\partial/\partial \mathbf{r}_j$. Это дает следующие выражения. Скаляр Φ имеет вид

$$\Phi = \sum_j \frac{Z_j}{r_j}, \quad r_j = \sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}. \quad (6)$$

Здесь x_j, y_j, z_j – координаты точки \mathbf{r}_j . Компоненты вектора напряженности электрического поля \mathbf{E} имеют следующий вид:

$$\mathbf{E} = \sum_j \frac{Z_j}{r_j^3} \mathbf{e}_j, \quad (e_x)_j = x_j, \quad (e_y)_j = y_j, \quad (e_z)_j = z_j. \quad (7)$$

Матрица квадрупольного момента симметрична, а ее компоненты равны

$$U = \sum_j \frac{Z_j}{r_j^5} u_j, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} (u_{xx})_j &= 3x_j^2 - r_j^2, & (u_{yy})_j &= 3y_j^2 - r_j^2, & (u_{zz})_j &= 3z_j^2 - r_j^2, \\ (u_{xy})_j &= 3x_j y_j, & (u_{xz})_j &= 3x_j z_j, & (u_{yz})_j &= 3y_j z_j. \end{aligned} \quad (9)$$

Нетрудно заметить, что $u_{zz} = -u_{xx} - u_{yy}$, так что $\text{Tr } U = 0$. Таким образом, из 10 компонент матрицы U только 5 являются независимыми.

Октупольный тензор симметричен по любой паре индексов. Поэтому из 27 компонент независимы только 10. Они равны

$$W = \sum_j \frac{Z_j}{r_j^7} w_j, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} (w_{xxx})_j &= x_j(15x_j^2 - 9r_j^2), & (w_{yyy})_j &= y_j(15y_j^2 - 9r_j^2), & (w_{zzz})_j &= z_j(15z_j^2 - 9r_j^2), \\ (w_{xxy})_j &= y_j(15x_j^2 - 3r_j^2), & (w_{xxz})_j &= z_j(15x_j^2 - 3r_j^2), & (w_{xyy})_j &= x_j(15y_j^2 - 3r_j^2), \\ (w_{xzz})_j &= x_j(15z_j^2 - 3r_j^2), & (w_{yyz})_j &= z_j(15y_j^2 - 3r_j^2), & (w_{yzz})_j &= y_j(15z_j^2 - 3r_j^2), \\ & & (w_{xyz})_j &= 15x_j y_j z_j. \end{aligned} \quad (11)$$

3 Функции распределения компонент мультиполей

Согласно модели QUIP, будем считать, что положение каждой j -й частицы в атомной ячейке случайно, сферически симметрично, положения различных частиц независимы, а закон распределения по радиусу для всех частиц

одинаков. Последнее означает, что Mr_j^{-n} не зависит от j . Обозначим это математическое ожидание через

$$Mr^{-n} \equiv Mr_j^{-n}. \quad (12)$$

Это достаточно естественные предположения. Именно они позволяют применять закон больших чисел. Чтобы максимально использовать преимущества такого подхода, будем выражать моменты микрополя через Mr^{-n} .

Из сферической симметрии для всех частиц следует, что

$$Mx_j^\alpha y_j^\beta z_j^\gamma r_j^{-\delta} = 0, \quad (13)$$

если среди целых степеней α, β, γ есть хотя бы одна нечетная.

Далее будем определять функции распределения компонент мультиполей из первого принципа – закона больших чисел.

Скалярная компонента

Величина Φ является суммой (6) независимых случайных величин. Из электронейтральности (2) и формулы (12) следует, что

$$M\Phi = M\left(\sum_j \frac{Z_j}{r_j}\right) = \sum_j Z_j (Mr^{-1}) = 0. \quad (14)$$

Таким образом, средний потенциал $\langle \Phi \rangle$ равен нулю.

Скаляр Φ является суммой большого числа независимых слагаемых, поэтому его функция распределения является гауссовой. С учетом (14) она имеет следующий вид:

$$p(\Phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Phi_0} \exp\left(-\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}\right), \quad \Phi_0 \sim \frac{Z_D}{R}. \quad (15)$$

Здесь Z_D – средний заряд, R – радиус атомной ячейки. Такая зависимость Φ_0 от заряда и радиуса очевидна из соображений размерности.

Для определения Φ_0 найдем дисперсию $D\Phi$. Поскольку $M\Phi = 0$, то

$$\begin{aligned} D\Phi = M\Phi^2 &= M\left(\sum_j \frac{Z_j}{r_j}\right)^2 = M\left(\sum_{j,k} \frac{Z_j Z_k}{r_j r_k}\right) = \\ &= M\left(\sum_j \frac{Z_j^2}{r_j^2}\right) + M\left(\sum_{j \neq k} \frac{Z_j Z_k}{r_j r_k}\right) = \sum_j Z_j^2 (Mr^{-2}) + \sum_{j \neq k} Z_j Z_k (Mr^{-1})^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Произведем сложение и вычитание последнего выражения с суммой

$$\sum_j Z_j^2 (Mr^{-1})^2. \quad (17)$$

Прибавление аннулирует сумму по несовпадающим индексам в (16)

$$\sum_{j \neq k} Z_j Z_k (Mr^{-1})^2 + \sum_j Z_j^2 (Mr^{-1})^2 = \left(\sum_j Z_j \right)^2 (Mr^{-1})^2 = 0$$

в силу электронейтральности. Остается вычитание (17), что дает

$$D\Phi = \sum_j Z_j^2 \left[Mr^{-2} - (Mr^{-1})^2 \right]. \quad (18)$$

Отсюда видно, что средний заряд определяется формулой

$$Z_D = \left(\sum_j Z_j^2 \right)^{1/2}, \quad (19)$$

где сумма берется по всем ионам и электронам. Это усреднение по Дебаю, а не по Хольцмарку, вопреки тому, что считалось последние 100 лет. Напомним, что усреднение заряда по Хольцмарку имеет следующий вид:

$$Z_H = \left(\sum_j |Z_j|^{3/2} \right)^{2/3}. \quad (20)$$

Однако отметим, что количественное отличие зарядов Z_D и Z_H невелико. Для электронейтральной плазмы, состоящей из ионов заряда Z и электронов, оно равно

$$Z_H/Z_D = (1 + Z^{-1/2})^{2/3} (1 + Z^{-1})^{-1/2}. \quad (21)$$

Зависимость этого отношения от Z показана на рис. 2, где для наглядности выбран полулогарифмический масштаб. Видно, что всегда $Z_H > Z_D$, причем это отличие максимально вблизи $Z = 3$ и составляет $\sim 17\%$. Можно показать, что для смеси разных ионов отличие будет еще меньше. Поэтому наше уточнение среднего заряда является теоретически принципиальным, но количественно не слишком большим.

Дипольный вектор

Каждая компонента вектора \mathbf{E} есть сумма (7) большого числа равноправных слагаемых. В эту сумму входят компоненты x_j или y_j или z_j . Тогда $ME_x = ME_y = ME_z = 0$ в силу формулы (13). Поэтому функция распределения каждой компоненты будет гауссовой с нулевым средним:

$$p(E_x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} E_0} \exp \left(-\frac{E_x^2}{E_0^2} \right), \quad E_0 \sim \frac{Z_D}{R^2} \quad (22)$$

и т.д. Зависимость E_0 от Z_D и R определяется из соображений размерности. Коэффициент пропорциональности будет определен ниже. Покажем,

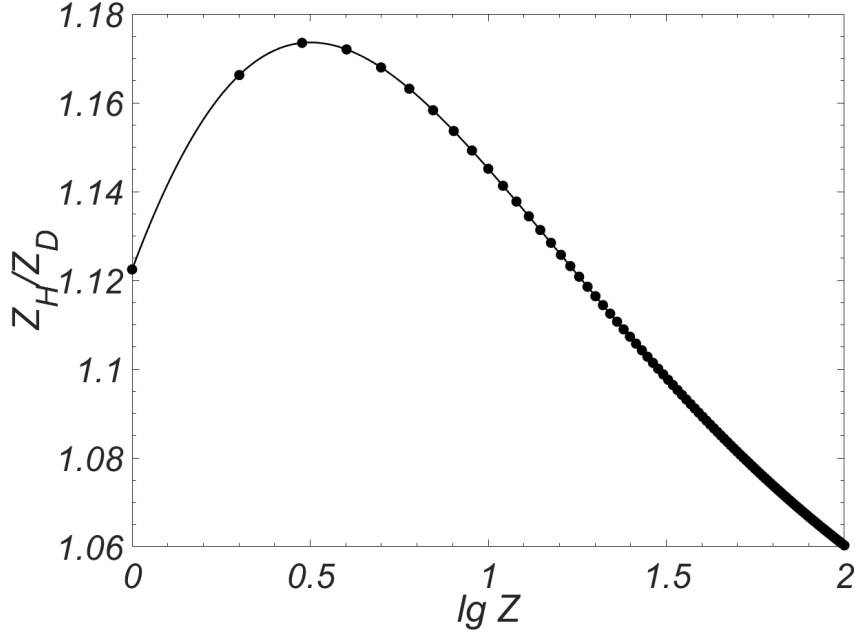


Рис. 2: Отличие Z_H и Z_D

что в формуле (22) должен стоять именно дебаевский заряд Z_D . Для этого вычислим дисперсию DE_x . Поскольку $ME_x = 0$, то

$$DE_x = ME_x^2 = M\left(\sum_j \frac{Z_j}{r_j^3} x_j\right)^2 = M\left(\sum_{j,k} \frac{Z_j Z_k x_j x_k}{r_j^3 r_k^3}\right). \quad (23)$$

При усреднении $x_j x_k$ по углам все слагаемые обращаются в нуль при $j \neq k$ согласно формуле (13). В силу равноправия координат средние по углам от x_j^2 , y_j^2 , z_j^2 одинаковы и равны $r_j^2/3$. Отсюда получаем

$$DE_x = \frac{1}{3} \left(\sum_j Z_j^2 \right) M r^{-4} = \frac{Z_D^2}{3} M r^{-4}. \quad (24)$$

Видно, что входящий сюда заряд есть усреднение по Дебаю, как и для скалярной компоненты.

Покажем, что компоненты вектора \mathbf{E} некоррелированы. В самом деле,

$$M(E_x E_y) = M\left(\sum_{j,k} \frac{Z_j Z_k x_j y_k}{r_j^3 r_k^3}\right) = 0, \quad (25)$$

поскольку усреднение произведений $x_j y_k$ по их углам равно нулю при любых индексах в силу формулы (13).

Поскольку компоненты вектора \mathbf{E} независимы и каждая из них распределена по Гауссу, то длина E этого вектора распределена по Максвеллу с тем же масштабом E_0

$$p(E) = \frac{4E^2}{\sqrt{\pi} E_0^3} \exp\left(-\frac{E^2}{E_0^2}\right). \quad (26)$$

Заметим, что скаляр Φ некоррелирован с компонентами \mathbf{E} . В самом деле, $M\Phi = 0$ и $ME_x = 0$, поэтому

$$\text{corr}(\Phi, E_x) \sim M(\Phi E_x) = \sum_{j,k} \frac{Z_j Z_k x_k}{r_j r_k^3} = 0, \quad (27)$$

поскольку усреднение величин x_k по углам дает нуль. Однако можно показать, что величины Φ и E^2 коррелированы. В самом деле, поскольку $M\Phi = 0$, то корреляция $\text{corr}(\Phi, E^2) \sim M(\Phi E^2)$. Последняя величина легко вычисляется подстановкой сумм (6), (7):

$$M(\Phi E^2) = \sum_j Z_j^3 [Mr^{-5} - (Mr^{-4})(Mr^{-1})]. \quad (28)$$

Для электронейтральной смеси электронов и однозарядных ионов сумма в (28) равна нулю, то есть корреляция отсутствует. Однако если присутствуют многозарядные ионы, то эта сумма будет положительной. Заметим, что сумма в (28) уже не сводится к дебаевскому заряду.

Квадрупольная матрица

Аналогично исследуем матрицу U . Напомним, что из 9 ее компонент только 5 оказываются независимыми.

Согласно закону больших чисел, компоненты матрицы U распределены по Гауссу. Для всех недиагональных компонент $MU_{xy} = MU_{yz} = MU_{xz} = 0$ в силу формулы (13), поскольку они содержат в числителе произведения первых степеней координат. Для диагональных элементов также $MU_{xx} = MU_{yy} = MU_{zz} = 0$, поскольку усреднение по углам $3x_j^2, 3y_j^2, 3z_j^2$ дает r_j^2 .

Дисперсии недиагональных компонент вычислим аналогично (23). Для слагаемых вида $x_j y_j x_k y_k$ и подобных им математическое ожидание равно нулю при $j \neq k$ в силу формулы (13). Остаются четные степени вида $x_j^2 y_j^2$, которые легко усредняются по углам. Это дает

$$DU_{xy} = DU_{xz} = DU_{yz} = (3/5)Z_D^2 Mr^{-6}. \quad (29)$$

Для диагональных компонент возникают выражения вида $x_j^2 r_k^2$ и $x_j^2 x_k^2$. Первые выражения легко усредняются по углам. Во вторых выражениях усреднение при $j = k$ и $j \neq k$ происходит по-разному. В этом случае следует использовать условие электронейтральности, как это было при вычислении $D\Phi$. Окончательный результат таков:

$$DU_{xx} = DU_{yy} = DU_{zz} = (4/5)Z_D^2 Mr^{-6}. \quad (30)$$

Отметим, что в выражения (29) и (30) опять входит дебаевский заряд.

Таким образом, масштабы гауссовых распределений для диагональных компонент

$$p(U_{xx}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}U_0} \exp\left(-\frac{U_{xx}^2}{U_0^2}\right), \quad U_0 \sim \frac{Z_D}{R^3} \quad (31)$$

и для недиагональных компонент

$$p(U_{xy}) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}U_0} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{U_{xy}^2}{U_0^2}\right) \quad (32)$$

несколько различаются.

Нетрудно видеть, что корреляции любой из компонент матрицы U и любой из компонент вектора \mathbf{E} равны нулю

$$\text{corr}(E_x, U_{xx}) = \text{corr}(E_x, U_{xy}) = \dots = 0. \quad (33)$$

В самом деле, математические ожидания этих компонент равны нулю. Произведения этих компонент содержат, по меньшей мере, одну нечетную степень какой-нибудь координаты. Поэтому математические ожидания таких произведений также равны нулю. Таким образом, вектор \mathbf{E} и матрица U некоррелированы. Отсюда следует, что совместное распределение компонент дипольного вектора и квадрупольной матрицы сводится к произведению распределений, например, $p(E_x, U_{xx}) = p(E_x)p(U_{xx})$.

Поскольку некоторые элементы матрицы явно выражаются друг через друга, то соответствующие корреляции отличны от нуля

$$\begin{aligned} \text{corr}(U_{xy}, U_{yx}) &= \text{corr}(U_{xz}, U_{zx}) = \text{corr}(U_{yz}, U_{zy}) = +1, \\ \text{corr}(U_{xx}, U_{yy}) &= \text{corr}(U_{xx}, U_{zz}) = \text{corr}(U_{yy}, U_{zz}) = +1/2. \end{aligned} \quad (34)$$

Все остальные корреляции равны нулю.

Октупольный тензор

Напомним, что из 27 компонент этого тензора 3-го ранга только 10 являются независимыми в силу симметрии относительно перестановки любой пары индексов (8). Согласно закону больших чисел, распределение каждой компоненты является гауссовым. Каждая из компонент содержит нечетную степень какой-либо координаты, поэтому математическое ожидание любой компоненты равно нулю $MW_{xxx} = \dots = 0$. Очевидно, последнее утверждение верно для любых тензоров нечетного ранга, появляющихся в более высоких членах мультипольного разложения.

Вычислим дисперсии компонент тензора W . Из вида компонент (8) нетрудно заметить, что всегда будут возникать произведения вида $x_j x_k$, $y_j y_k$, $z_j z_k$ либо кубы этих произведений. Выполним усреднение по углам. При $j \neq k$ усреднение их по углам дает нуль, так что ненулевыми остаются только слагаемые с $j = k$. Отсюда для 6 компонент, у которых все 3 индекса соответствуют разным координатам, дисперсии одинаковы и равны

$$DW_{xyz} = \dots = (15/7)Z_D^2 M r^{-8}. \quad (35)$$

Для 18 компонент, у которых в индексе 2 координаты совпадают, а третья иная, дисперсии также одинаковы и равны

$$DW_{xxy} = DW_{xxz} = \dots = (24/7)Z_D^2 M r^{-8}. \quad (36)$$

Для 3 компонент, у которых все три индекса соответствуют одной координате, дисперсии равны

$$DW_{xxx} = DW_{yyy} = DW_{zzz} = (36/7)Z_D^2 Mr^{-8}. \quad (37)$$

Видно, что дисперсии этих трех видов компонент сильно различаются. Однако во все эти компоненты входит дебаевский заряд.

Соответственно, распределения для этих трех типов компонент будут иметь следующий вид

$$p(W_{xxx}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}W_0} \exp\left(-\frac{W_{xxx}^2}{W_0^2}\right), \quad W_0 \sim Z_D/R^4, \quad (38)$$

$$p(W_{xxy}) = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2\pi}W_0} \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{W_{xxy}^2}{W_0^2}\right), \quad (39)$$

$$p(W_{xyz}) = \frac{\sqrt{12}}{\sqrt{5\pi}W_0} \exp\left(-\frac{12}{5} \frac{W_{xyz}^2}{W_0^2}\right). \quad (40)$$

Очевидно, нечетный тензор W некоррелирован с четными матрицей U и скаляром Φ :

$$\begin{aligned} \text{corr}(U_{xx}, W_{xxx}) &= \text{corr}(U_{xx}, W_{xxy}) = \text{corr}(U_{xx}, W_{xyz}) = \dots = 0, \\ \text{corr}(\Phi, W_{xxx}) &= \text{corr}(\Phi, W_{xxy}) = \text{corr}(\Phi, W_{xyz}) = \dots = 0. \end{aligned} \quad (41)$$

Вопрос о корреляциях нечетного тензора W с нечетным вектором \mathbf{E} нетривиален. Однако непосредственные вычисления показывают, что они также некоррелированы между собой:

$$\text{corr}(E_x, W_{xxx}) = \text{corr}(E_x, W_{xxy}) = \text{corr}(E_x, W_{xyz}) = \dots = 0. \quad (42)$$

4 Нахождение масштабных коэффициентов

Для практического использования полученных распределений нужно знать масштабные множители Φ_0 , E_0 , U_0 , W_0 , ... Они выражаются через Mr^{-n} . Однако для определения этих математических ожиданий требуются дополнительные модельные соображения. При этом чем выше степень n , тем сильнее зависит величина математического ожидания от этих модельных соображений.

Наименьшие степени (и, тем самым, наименьшая зависимость от модели) получаются при определении Φ_0 согласно (18). Разумную оценку можно получить, даже взяв равномерное распределение частиц по объему ячейки (как первоначально предполагалось в модели QUIP). В этом случае $Mr^{-1} = (3/2)R^{-1}$ и $Mr^{-2} = 3R^{-2}$. Это дает

$$\Phi_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{Z_D}{R}. \quad (43)$$

Для дополнительной проверки этого результата был проведен расчет МФ и ДФ статическим методом Монте-Карло. Малая трудоемкость статического метода позволила нам брать $\sim 10^5 - 10^7$ частиц, в то время как в динамических методах приходится ограничиваться $\sim 10^3$ частиц. Поэтому полученная погрешность была в 10 – 100 раз меньше, чем в динамических методах. Кроме того, в принципе отсутствовала проблема выхода частиц за границы области.

В расчете мы брали полностью ионизованную плазму с $Z = 3$, где различие Z_H и Z_D максимально. На рис. 3 показана зависимость МФ и ДФ от числа розыгрышей N . В каждый розыгрыш включались 1 ион и 3 электрона в сферической ячейке радиуса R . Видно, что расчетные значения выходят на соответствующие теоретические пределы со скоростью $\sim N^{-1/2}$. В теоретическом пределе брался заряд Z_D , который при $Z = 3$ на 17% отличался от Z_H . Поэтому совпадение расчета с теоретическим пределом убедительно демонстрирует правильность выбора дебаевского заряда.

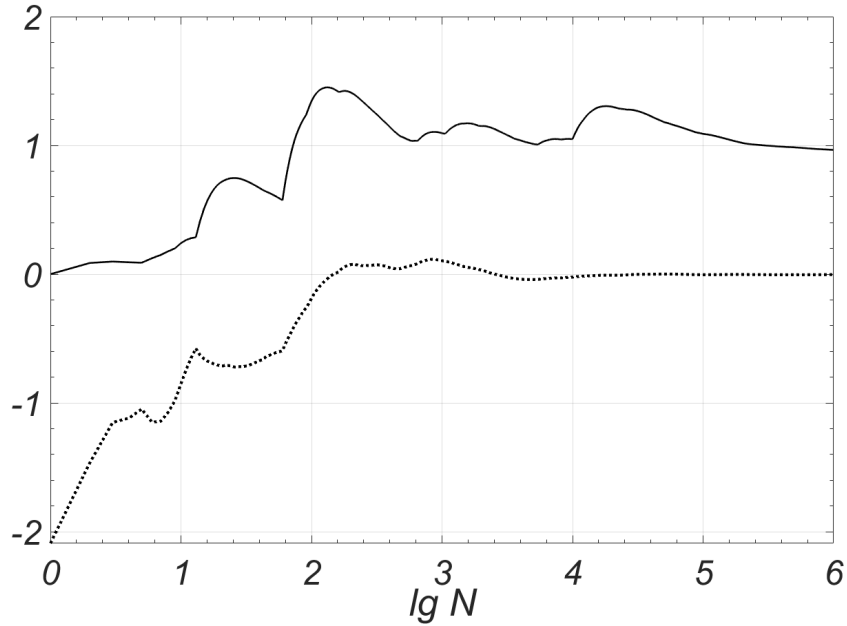


Рис. 3: Расчет статическим методом Монте-Карло для $Z = 3$, N – число розыгрышей. Сплошная линия – отношение ДФ к теоретическому пределу, пунктир – МФ.

Для вычисления более высоких моментов гипотеза о равномерном распределении приводит к бесконечным математическим ожиданиям. Однако из соображений размерности видно, что $Mr^{-n} \sim R^{-n}$. Далее нам потребуются только четные степени n . Поэтому введем следующие безразмерные коэффициенты:

$$C_E^2 = R^4 Mr^{-4}, \quad C_U^2 = R^6 Mr^{-6}, \quad C_W^2 = R^8 Mr^{-8}. \quad (44)$$

Оценим эти коэффициенты, привлекая дополнительные соображения.

Энергия микрополя

Из мультипольного разложения потенциала (4) следует аналогичное выражение для напряженности неоднородного электрического поля

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E} + U\mathbf{r} + (1/2)W\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots, \quad r \leq R. \quad (45)$$

Локальная плотность энергии выражается через квадрат напряженности

$$\begin{aligned} E^2(\mathbf{r}) &\equiv \mathbf{E}(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \\ &= \mathbf{E}\mathbf{E} + 2\mathbf{E}U\mathbf{r} + \mathbf{r}UU\mathbf{r} + \mathbf{E}W\mathbf{r}\mathbf{r} + \mathbf{r}UW\mathbf{r}\mathbf{r} + (1/4)\mathbf{r}\mathbf{r}WW\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь учтена симметрия матрицы и тензора, а все умножения векторов, матриц и тензоров выполняются по правилам линейной алгебры. Нам следует брать мгновенные распределения частиц в пространстве и проводить усреднения компонент мультиполей по гауссовым распределениям (22), (31), (32), (38) – (40). Выше мы установили, что такое усреднение дает нуль для произведений $\mathbf{E}U$ и UW в силу разной четности, и $\mathbf{E}W$ в силу некоррелированности. Поэтому указанные слагаемые можно откинуть. Без их учета выражение для мгновенной плотности энергии имеет вид

$$E^2(\mathbf{r}) = \mathbf{E}\mathbf{E} + \mathbf{r}UU\mathbf{r} + (1/4)\mathbf{r}\mathbf{r}WW\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots \quad (47)$$

Произведем в (47), во-первых, умножение матриц UU и тензоров WW . Во-вторых, усредним полученные выражения по расположениям частиц. Мгновенная плотность энергии (47), вообще говоря, зависит от направления \mathbf{r} и не имеет сферической симметрии. Однако после усреднения по расположениям частиц зависимость от угла пропадает, и плотность энергии зависит только от скалярного радиуса r (при этом недиагональные элементы произведений обратятся в нули). Остается подставить дисперсии и корреляции, выраженные через Mr^{-n} . В результате плотность энергии, усредненная по расположениям частиц, будет иметь вид

$$\langle E^2(r) \rangle = Z_D^2 (Mr^{-4} + 2r^2Mr^{-6} + (18/5)r^4Mr^{-8} + \dots). \quad (48)$$

В-третьих, для нахождения энергии электрического поля в атомной ячейке радиуса R проинтегрируем выражение $\langle E^2/(8\pi) \rangle$ по объему этой ячейки

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \int E^2(r) d\mathbf{r} &= \frac{Z_D^2}{6} \left(R^3 M \frac{1}{r^4} + \frac{6}{5} R^5 M \frac{1}{r^6} + \frac{54}{35} R^7 M \frac{1}{r^8} + \dots \right) = \\ &= \frac{Z_D^2}{6R} \left(C_E^2 + \frac{6}{5} C_U^2 + \frac{54}{35} C_W^2 + \dots \right). \end{aligned} \quad (49)$$

Получается разложение по коэффициентам C , не содержащим какого-либо физического параметра разложения. Оно может сходиться только в том случае, если коэффициенты достаточно быстро убывают. Для оценочного определения коэффициентов используем следующие соображения.

Во-первых, в [59] показано, что полная энергия электрического поля в ячейке (49) должна точно компенсировать энергию прямого взаимодействия заряженных частиц в плазме. Последняя энергия с хорошей точностью равна $-(9/10)(Z_D^2/R)$. Эта величина практически одинакова как в разреженном высокотемпературном газе (где она называется поправкой на неоднородность), так и в ионном кристалле (постоянная Маделунга). Отсюда сумма членов ряда в скобке в правой части (49) равна $27/5$.

Во-вторых, максимум распределения $p(E)$ должен достаточно хорошо совпадать с максимумом распределения Хольцмарка, который достигается примерно при $1.65Z/R^2$.

Мы приняли, что члены в правой части суммы (49) убывают примерно как геометрическая прогрессия со знаменателем q . Удалось подобрать значение $q = 2/9$, при котором коэффициенты равны

$$C_E = \sqrt{21/5}, \quad C_U = \sqrt{7/15}, \quad C_W = 14\sqrt{6}/81, \dots \quad (50)$$

При этом энергия поля точно компенсирует энергию электростатического взаимодействия, а максимум распределения достигается при $\sqrt{14/5}Z_D/R^2 \approx 1.67Z_D/R^2$, что в пределах одного процента согласуется с максимумом распределения Хольцмарка. Соответствующее распределение напряженности показано на рис. 1. В отличие от распределения Хольцмарка, оно имеет не степенную, а максвелловскую асимптотику и очень быстро затухает на бесконечности. Это позволяет избежать нефизичных результатов, которые возникают в моделях, основанных на интеграле Фурье.

Заметим, что ряд для полной энергии (49) сходится быстро. Поэтому более высокие мультиполи практически не влияют на значения коэффициентов. Однако ряд для локальной плотности (48) медленно сходится при $r \sim R$. Микрополе можно считать однородным лишь при $r^2 \ll R^2$ (реально при $r < 0.3R$). Поэтому учет неоднородности микрополя необходим.

Заметим, что мгновенное микрополе во всем пространстве непрерывно. Однако если мы считаем поле в каждой ячейке однородным, то мгновенные поля соседних ячеек не будут непрерывно стыковаться на границах. Учет бесконечного разложения в ряд по мультиполям должен непрерывно и гладко склеивать мгновенные микрополя в соседних ячейках.

Слабоионизованный газ

В окончательные формулы модели входит дебаевский заряд Z_D и радиус R . В случае полностью ионизованной плазмы R есть радиус средней сферизованной атомной ячейки. Это такая ячейка, которая содержит в среднем 1 ион и соответствующее число свободных электронов, обеспечивающих электронейтральность. Тогда

$$R = \left(\frac{3V}{4\pi} \right)^{1/3}, \quad V = \frac{1}{\mathcal{N}}, \quad (51)$$

где V – средний объем на одну тяжелую частицу, \mathcal{N} – концентрация тяжелых частиц.

Пусть плазма содержит смесь ионов с зарядами Z_k ($k = 1, 2, \dots$). Обозначим относительную долю содержания каждого иона (относительную концентрацию) через ξ_k , а относительную концентрацию свободных электронов через ξ_e . Тогда имеют место законы сохранения числа частиц и заряда:

$$\sum_{k \geq 1} \xi_k = 1, \quad \sum_{k \geq 1} Z_k \xi_k = \xi_e. \quad (52)$$

В этих обозначениях дебаевский заряд определяется формулой

$$Z_D^2 = (-1)^2 \xi_e + \sum_{k \geq 1} Z_k^2 \xi_k \equiv \xi_e + \sum_{k \geq 1} Z_k^2 \xi_k \equiv \sum_{k \geq 1} (Z_k^2 + Z_k) \xi_k. \quad (53)$$

Напомним, что Z_k – натуральные числа. Нетрудно заметить, что $Z_D^2 \geq 2$.

На практике приходится иметь дело со слабоионизованными газами, которые содержат не только ионы, но и нейтральные атомы. По-прежнему обозначим через \mathcal{N} концентрацию всех тяжелых частиц, а через V – объем ячейки, содержащей в среднем одну тяжелую частицу. К заряженным частицам добавились нейтральные частицы, которым припишем индекс $k = 0$, заряд $Z_0 = 0$ и концентрацию ξ_0 . Теперь законы сохранения числа частиц и заряда примут следующий вид:

$$\sum_{k \geq 0} \xi_k = 1, \quad \sum_{k \geq 0} Z_k \xi_k \equiv \sum_{k \geq 1} Z_k \xi_k = \xi_e. \quad (54)$$

Теперь суммарная концентрация ионов равна не 1, а $1 - \xi_0$. Возьмем ячейку увеличенного объема $V/(1 - \xi_0)$. Нетрудно видеть, что в такой ячейке в среднем будет содержаться один ион. К такой ячейке можно применить предыдущие формулы для определения радиуса и дебаевского заряда. Это дает для слабоионизованных газов

$$Z_D^2 = \frac{1}{1 - \xi_0} \left(\xi_e + \sum_{k \geq 1} Z_k^2 \xi_k \right), \quad R = \left[\frac{3V}{4\pi(1 - \xi_0)} \right]^{1/3}. \quad (55)$$

В слабоионизованных газах R обычно оказывается большим. Это приводит к тому, что неоднородность микрополя становится существенно меньшей.

5 Апробация модели

Эксперименты

Надежной апробацией теоретических моделей является только сравнение с экспериментами. Наиболее чувствительны к величине микрополя

числа линий, наблюдаемых в спектральных сериях. Опишем эксперименты, наиболее подходящие для такого сравнения.

С 1984 года в Лаборатории физики плазмы Университета Рочестера (Нью-Йорк) проводились, совместно с ядерными центрами США, уникальные эксперименты по спектрам лазерной плазмы (см. [60] – [65] и цитированную литературу). В них сферическая оболочка диаметром 0.1-1.0 мм наполнялась смесью Ar, Kr и других газов. Такая мишень нагревалась мощной многопучковой лазерной системой. Образовывалась плазма, в которой достигались высокие температуры и плотности. При этом вещество почти полностью ионизовано, и плазма содержит лишь небольшое количество водородо- и гелиеподобных ионов Ar, а также ионы Kr с L -оболочкой.

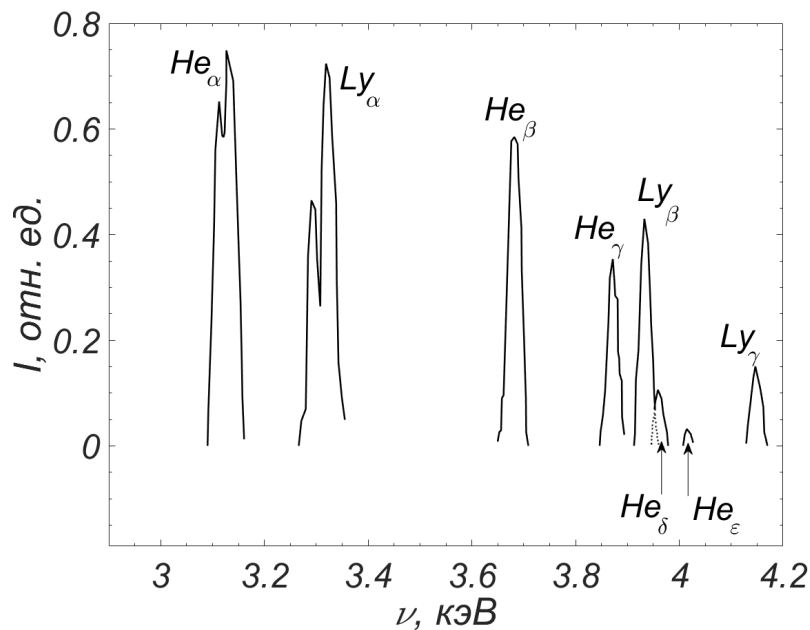


Рис. 4: Рентгеновский спектр лазерной плазмы в эксперименте [61].

Измерялись рентгеновские спектры этих ионов в диапазоне 2.9-4.2 кэВ. Пример такого спектра приведен на рис. 4 [61]. Данный спектр показывает не мгновенное состояние, а является интегралом по всему времени свечения мишени. Ширины линий достигают ~ 50 эВ. В серии гелиеподобного иона Ar^{+16} интенсивны первые три линии. Четвертая довольно слаба, а пятая еле заметна. Таким образом, видна вся серия линий этого иона. Аналогичные эксперименты проводились в Национальных лабораториях Сандиа (Альбукерке), см., например, [66], [67].

К сожалению, в диапазон спектрального прибора попадает только 3 линии водородоподобной серии Ar^{+17} , причем их интенсивности слабо убывают. Уже четвертая линия лежит за пределами экспериментального диапазона. Поэтому данная серия дает мало информации для тестирования модели микрополя.

Мы выбрали для анализа работы [61], [66] потому, что в них приведена

целая серия линий (в обеих работах одна и та же). Насколько нам известно, таких публикаций всего две. Именно наблюдаемое число линий серии лучше всего позволяет оценить влияние микрополя. К сожалению, остальные эксперименты указанных лабораторий и ряда других выполнены на узкополосной аппаратуре, и в них наблюдаются от 1 до 3 линий каждой серии одновременно. Сказанное справедливо как для высокоплотной лазерной плазмы (см., например, [68] – [70] и цитированную литературу), так и для плазмы с низкой плотностью в токамаках (см., например, [71], [72] и ссылки в этих работах) и газовых разрядах (см. обзор [73] и приведенную в нем литературу). Это существенно снижает полезность таких экспериментов для апробации моделей.

Интенсивность каждой линии определяется через площадь ее контура на рис. 4. Абсолютные интенсивности зависят от многих плохо известных факторов, в том числе зависимости температуры и плотности от времени. Эти величины непосредственно не измеряются, их косвенно определяют на основании газодинамического расчета. Однако применимость существующих газодинамических кодов к микроишениям вызывает сомнения. Это существенно затрудняет интерпретацию эксперимента. Чтобы исключить плохо известные факторы, будем нормировать все интенсивности на интенсивность первой линии. Нормированные интенсивности даны на рис. 5.

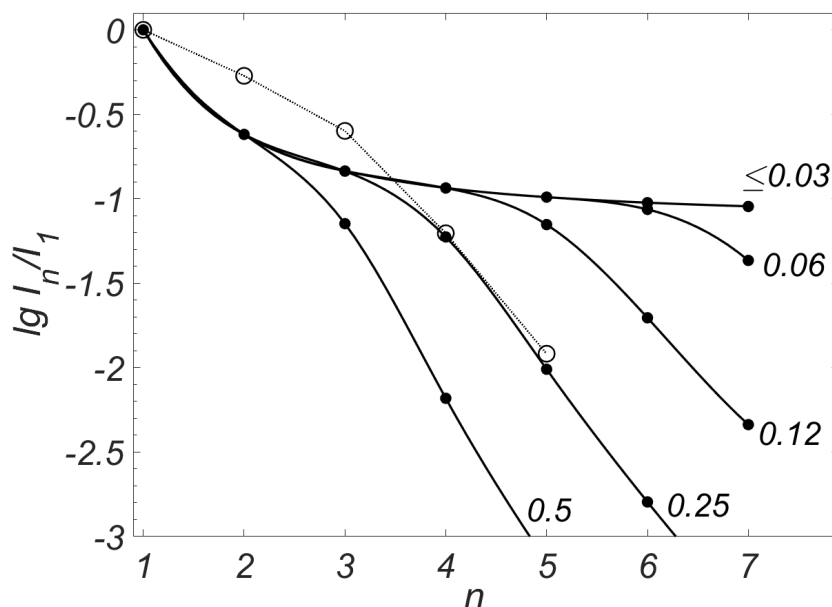


Рис. 5: Относительные интенсивности линий спектра Ar^{+16} ; \circ – эксперимент [61], \bullet – данная модель. Цифры около линий – плотность, г/см^3 .

Интерпретация

Линии серии соответствуют переходам с возбужденных уровней на основную. Рассмотрим факторы, определяющие интенсивность линии.

Во-первых, электронные уровни обрезаются линейной компонентой микрополя. Когда мгновенный линейный потенциал микрополя накладывается на кулоновскую яму (см. рис. 6), то суммарное поле имеет седловую точку. Сохраняются только уровни, лежащие ниже седловой точки. Для определения вероятности сохранения уровня необходимо провести интегрирование по функции распределения напряженности. Теория этого эффекта изложена в [54] – [56]. Вероятность сохранения уровня уменьшается с его номером. Для глубоких уровней это уменьшение медленное, но начиная с некоторого номера оно резко ускоряется. Этот эффект тем сильнее, чем плотнее плазма.

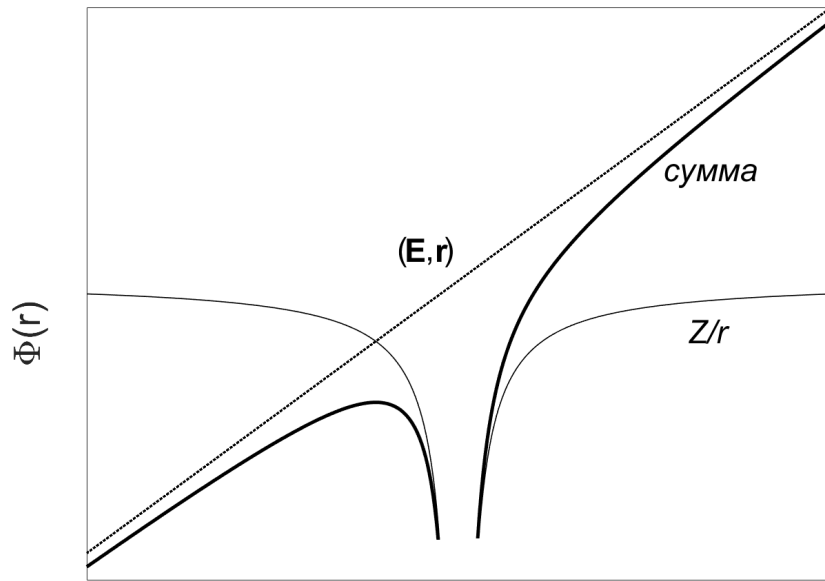


Рис. 6: Кулоновская яма с микрополем.

Во-вторых, заселенности уменьшаются за счет больцмановского фактора $\exp(-\varepsilon/T)$, где ε – энергия уровня. Этот эффект не зависит от плотности.

В-третьих, интенсивность линии пропорциональна так называемой силе осциллятора – вероятности перехода с верхнего уровня на нижний [74]. Эта вероятность определяется через интеграл от радиуса-вектора, свернутого с волновыми функциями начального и конечного состояний. В сильно разреженной плазме эти волновые функции можно считать водородоподобными. Расчеты сил осцилляторов в водородоподобном приближении приведены в [75] и [76]. Однако результаты этих двух источников не согласуются между собой, хотя такая постановка задачи является простейшей. Это говорит о нетривиальности такого расчета. Очевидно, для неводородоподобных волновых функций вопрос о силах осцилляторов еще менее ясен. Для плотной плазмы лазерных мишеней водородоподобное приближение уже не справедливо, что не позволяет надежно рассчитать силы

осцилляторов.

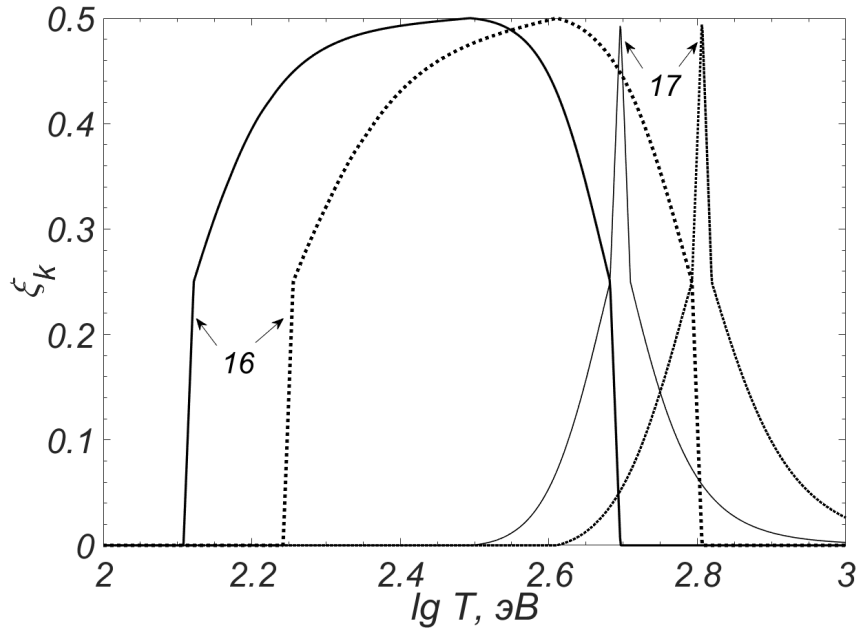


Рис. 7: Концентрации ионов Ar^{+16} и Ar^{+17} в эксперименте [61]. Сплошные линии – $\rho = 0.1 \text{ г/см}^3$, пунктир – $\rho = 1 \text{ г/см}^3$. Цифры около кривых – кратность иона.

Определим температуру из следующих соображений. Решение уравнений ионизационного равновесия показывает, что концентрация каждого иона при повышении температуры сначала исчезающе мала, потом начинает быстро нарастать, достигает максимума, затем быстро убывает. Для состава описанных мишеней температурные зависимости концентрации ионов Ar^{+16} и Ar^{+17} приведены на рис. 7 для двух плотностей вещества $\rho = 0.1$ и 1.0 г/см^3 . Для Ar^{+16} положения максимумов отличаются на $\sim 30\%$. Далее для этого иона мы принимаем среднее значение экстремума $T_{\text{max}} = 0.35 \text{ кэВ} \pm 15\%$. Аналогично для иона Ar^{+17} получаем среднее значение экстремума $T_{\text{max}} = 0.56 \text{ кэВ} \pm 12\%$. Таким образом, серии линий на рис. 4 следует относить не к одной и той же температуре, а к разным!

Поэтому вызывает удивление интерпретация экспериментов в работах [60] – [65]. В них линии обеих серий (и гелие-, и водородоподобную) приписывают температуре $T \geq 1 \text{ кэВ}$. Однако при этой температуре концентрация Ar^{+17} невелика, а Ar^{+16} – пренебрежимо мала. Это показывает ненадежность газодинамических расчетов микромишеней.

Мы провели расчеты ослабления относительных интенсивностей линий серии Ar^{+16} , принимая найденную выше температуру $T \approx 0.35 \text{ кэВ}$. Незвестную среднюю плотность мишени мы варьировали в широких пределах.

На рис. 5 показаны относительные интенсивности линий при учете микрополевого обрезания и больцмановского фактора (силы осциллятора мы не включали, поскольку выше было показано, что традиционно применяемое водородоподобное приближение несправедливо, а расчеты по более

сложным моделям ненадежны). Видно, что наилучшее согласие с экспериментом получилось при $\rho \approx 0.25$ г/см³. При увеличении плотности слишком велико микрополевое обрезание. При уменьшении плотности теория предсказывает чрезмерное количество линий. При этом радиус атомной ячейки $R \approx 8.7$, а средняя степени ионизации $\xi_e \approx 26.0$.

Покажем, что вычислять силы осцилляторов с водородоподобными волновыми функциями для верхних линий серии здесь неправомерно. В самом деле, согласно [74], средний радиус m -го водородоподобного уровня есть $3m^2/(2Z)$. Для 5-й линии $m = 6$; поскольку это электрон K -оболочки аргона, то надо полагать $Z = 18$. Это дает радиус $r_6 = 3$. Сам этот радиус в 2.9 раз меньше радиуса атомной ячейки. Однако «хвост» волновой функции недостаточно затухает к границе ячейки. Использование водородоподобных волновых функций многократно превышает средний радиус. В данном случае это явно не выполняется.

Видно, что построенная модель разумно описывает сразу все линии серии Ar^{+16} . При этом наша модель фактически не содержала подгоночных параметров, а подбиралась только неизвестная плотность того слоя мишени, который отвечает за свечение наблюдаемых линий. Это свидетельствует об удовлетворительном качестве модели QUIP.

6 Заключение

Во многих работах (например, [60] – [73] и ряде других) делались попытки теоретически объяснить наблюдаемые спектры. Однако в этих работах не было сделано ни одного расчета относительных интенсивностей всех линий спектральной серии. В них лишь индивидуально описывались контуры отдельных линий. При этом для каждой линии подбиралось свое значение плотности, и значения плотностей для разных линий отличались друг от друга очень сильно – до 10 раз, что необъяснимо с точки зрения динамики сжатия и нагрева мишени.

Теоретическое предсказание числа наблюдаемых линий спектральной серии весьма чувствительно к выбору модели. Однако в подавляющем большинстве теоретических работ это число не только не сравнивается с экспериментом, но и вообще не рассчитывается. Насколько нам известно, только в работе [54] был проведен анализ наблюдаемого числа линий для некоторых известных моделей. Все они, за исключением модели QUIP, сильно расходились с экспериментом. Таким образом, предложенная здесь модель лучше описывает эксперимент, чем другие работы. Это является удовлетворительной апробацией модели QUIP и показывает, что она может использоваться для расчета оптических свойств лазерных термоядерных мишеней. Отметим также, что формулы этой модели записываются в

явном виде и несложны. Это является существенным преимуществом по сравнению с другими современными моделями, требующими очень сложных и трудоемких расчетов.

Таблицы, описывающие состояние микрополя, в настоящее время включаются в базу данных ТЕФИС. Эта база создана в Институте прикладной математики имени М.В. Келдыша и размещена по адресам tefis.keldysh.ru и tefis.ru. Она содержит теплофизические свойства веществ в огромном диапазоне температур и плотностей. База ТЕФИС ориентирована на использование в газодинамических расчетах мишеней управляемого термоядерного синтеза и большого числа других конструкций.

Работа поддержана грантом РНФ 16-11-10001-П.

Авторы искренне благодарны И.А. Козлитину за предоставление расчетов детального состава плазмы по модели ионизационного равновесия.

Список литературы

1. Holtsmark J. // Ann. Phys. 58 (1919), 577.
2. Demura A.V. // Int. J. Spectrosc. 2010 (2010), Article ID 671073, 42 P. doi: 10.1155/2010/671073.
3. Ecker G. // Z. Phys. 148:5 (1957), 593.
4. Ecker G., Müller K.G. // Z. Phys. 153:3 (1958), 317.
5. Baranger M., Mozer B. // Phys. Rev. 115:3 (1959), 521.
6. Mozer B., Baranger M. // Phys. Rev. 118:3 (1960), 626.
7. Hooper C.F., Jr. // Phys. Rev. 149:1 (1966), 77.
8. Hooper C.F., Jr. // Phys. Rev. 165:1 (1968), 215.
9. Hooper C.F., Jr. // Phys. Rev. 169:1 (1968), 193.
10. Iglesias C.A. et al. // Phys. Rev. A. 28:3 (1983), 1667.
11. Iglesias C.A., Lebowitz J.T. // Phys. Rev. A. 30 (1984), 2001.
12. Iglesias C.A. et al. // Phys. Rev. A. 31 (1985), 1698.
13. Dufty J.W. et al. // Phys. Rev. A. 31 (1985), 1681.
14. Iglesias C.A. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 65:1-3 (2000), 303.
15. Голосной И.О. // Матем. моделирование. 3:9 (1991), 49.

16. Голосной И.О. // Матем. моделирование. 4:6 (1992), 3.
17. Chandrasekhar S., von Neuman J. // Astrophys. J. 95 (1942), 489.
18. Chandrasekhar S., von Neuman J. // Astrophys. J. 97 (1943), 1.
19. Chandrasekhar S. // Rev. Modern Phys. 15:1 (1943), 1.
20. Кудрин Л.П., Шолин Г.В. // ДАН. 147 (1962), 342.
21. Шолин Г.В. // Оптика и спектроскопия. 26 (1969), 275.
22. Demura A.V., Sholin G.V. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 15 (1975), 881.
23. Демура А.В. Некоторые проблемы теории уширения водородных спектров в плазме. Дисс. канд. физ.мат. наук. Москва, Институт атомной энергии им. И.В. Курчатова, 1976, 176 с.
24. Демура А.В. и др. Атлас детальных штарковских профилей спектральных линий водорода в плотной плазме. Препринт ИАЭ им. И.В. Курчатова. 1991, №5349/6, 97 с.
25. Demura A.V., Stehle C. // AIP Conference Proceedings. 328 (1995), 177.
26. Demura A.V. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 54 (1995), 123.
27. Demura A.V. et al. // AIP Conference Proceedings. 645 (2002), 318.
28. Djurović S. et al. // Phys. Rev. E. 71 (2005), 036407.
29. Demura A.V. et al. // Eur. Phys. J. D. 46 (2008), 111.
30. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорретных задач. М.: Наука. 1979, 285 с.
31. Bohm D., Pines D. // Phys. Rev. 85 (1952), 338.
32. Bohm D., Pines D. // Phys. Rev. 92 (1953), 609.
33. Broyles A.A. // Phys. Rev. 100:4 (1955), 1181.
34. Broyles A.A. // Z. Phys. 151 (1958), 187.
35. Dharma-Wardana M.W.C., Perrot F. // Phys. Rev. A. 33:5 (1986), 3303.
36. Perrot F., Dharma-Wardana M.W.C. // Phys. Rev. A. 41:6 (1991), 3281.
37. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. B. 136:3 (1964), B864.
38. Kohn W., Sham L.J. // Phys. Rev. A. 140:4 (1965), A1133.

39. Perrot F., Dharma-Wardana M.W.C. // Phys. Rev. A. 30:5 (1984), 2619.
40. Perrot F., Dharma-Wardana M.W.C. // Phys. Rev. A. 31:2 (1985), 970.
41. Chihara J. // Phys. Rev. A. 44:2 (1991), 1247.
42. Massacrier G. // J. Quant. Spectros. Radiat. Transf. 51:1-2 (1994), 221.
43. Singh R., Deb B.M. // Phys. Rep. 311:2 (1999), 47.
44. Kohn W. // Rev. Modern Phys. 71:5 (1999), 1253.
45. Gilles D., Angelie A. // Ann. Phys.-Paris. 11:3 (1986), suppl. 3, 157.
46. Caillol J.M., Gilles D. // J. Stat. Phys. 100:5-6 (2000), 933.
47. Gilles D. Calcul de la repartition statistique du microchamp electrique dans les plasmas // Internal CEA-Report, 1997.
48. Gilles D. Methode de Monte-Carlo en Mècanique Statistique Appliquèe à la Physique des Plasmas, Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas, Université Paris XI, Lecture Notes, Orsay, France, 1997.
49. Potekhin A.Y. et al. // Phys. Rev. E. 65:3 (2002), Article ID 036412.
50. Brush S.G. et al. // J. Chem. Phys. 45:6 (1966), 2102.
51. Замалин В.М. и др. Методы Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977.
52. Acioli P.H. // J. Molec. Structure. 394:2-3 (1997), 75.
53. Камилов И.К. и др. // УФН, 169:7 (1999), 795.
54. Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. // ДАН. 411:1 (2006), 36.
55. Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. // ДАН. 418:5 (2008), 614.
56. Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. // Физика плазмы. 37:2 (2011), 214.
57. Zaid I., Mizuno D. // Phys. Rev. Lett. 117 (2016), 030602.
58. Белов А.А., Калиткин Н.Н. // ДАН. 489:1 (2019), 22.
59. Kalitkin N.N., Kozlitin I.A. // Ann. Phys. 396 (2018), 468.
60. Delamater N.D. et al. // Phys. Rev. A. 31:4 (1985), 2460.
61. Hooper C.F., Jr. et. al. // SPIE. High intensity laser-matter interactions. 913 (1988), 129.

62. Hooper C.F., Jr. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 44:1 (1990), 19.
63. Haynes D.A., Jr. et al. // Rev. Sci. Instruments. 66 (1995), 755.
64. Florido R. et al. // Rev. Sci. Instruments. 79 (2008), 10E310.
65. Florido R. et al. // Phys. Plasmas. 21 (2014), 102709.
66. Burris-Mog T.J. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 99 (2006), 120.
67. Sinars D.B. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 99 (2006), 595.
68. Fournier K.B. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 71 (2001), 339.
69. Chambers D.M. et al. // Phys. Rev. E. 66 (2002), 026410.
70. Hakel P. et al. // Phys. Plasmas. 21 (2014), 063306.
71. Bitter M. et al. // Phys. Rev. A. 29:2 (1984), 661.
72. Goryaev F.F. et al. // JETP Letters. 78:6 (2003), 363.
73. Demura A. // MDPI Atoms. 2018. Vol. 6. P. 33.
74. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, изд. 6-е. М.: Физматлит, 2004, 800 с.
75. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. Методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000, 400 с.
76. Лисица В.С. Введение в нанооптику. М.: МФТИ, 2012, 159 с.