Физические процессы при формировании стационарной ультрахолодной неидеальной плазмы

С. Я. Бронин⁺, *Е. В.* Вихров⁺, *Б. Б.* Зеленер^{+*×}, *Б. В.* Зеленер⁺¹⁾

+ Объединенный институт высоких температур РАН, 127412 Москва, Россия

*Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт, 115409 Москва, Россия

[×] Национальный исследовательский университет Московский энергетический институт, 111250 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 сентября 2021 г. После переработки 6 октября 2021 г. Принята к публикации 12 октября 2021 г.

Мы представляем результаты прямого моделирования формирования двухкомпонентной стационарной неидеальной ультрахолодной плазмы при помощи непрерывного ионизирующего лазера. Показано, что формирование стационарной плазмы так же, как и в случае импульсной ионизации, определяется электрическим полем, создаваемым покидающими плазму быстрыми электронами. Это поле ускоряет ионы и удерживает оставшиеся электроны в плазме. При этом за счет непрерывной ионизации в определенный момент времени, зависящий от начальной энергии электронов и ионов, а также от плотности плазмы, достаточно быстро устанавливается стационарное распределение частиц плазмы по плотности и температуре частиц, которое может существовать в течение длительного времени.

DOI: 10.31857/S1234567821220031

Введение. Исследования ультрахолодной плазмы (УХП), которая последние 20 лет экспериментально и теоретически интенсивно изучается [1, 2], представляют большой интерес для понимания физических процессов в классической невырожденной плазме. УХП получается при однократной ионизации ультрахолодного газа (обычно щелочного или щелочно-земельного металла), находящегося в магнитооптической ловушке в глубоком вакууме, при помощи импульсного [1, 2] или непрерывного лазера [3]. Так как температура газа в этой ловушке составляет несколько милликельвинов, а плотность $10^7 - 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-3}$, то плазма достаточно разрежена и при этом взаимодействием заряд-нейтрал по сравнению с кулоновским взаимодействием можно пренебречь, т.е. рассматривать ее отдельно как полностью ионизованную. Начальная кинетическая энергия электронов определяется величиной отстройки ионизирующего лазера от потенциала ионизации и обычно лежит в интервале 0-200 К. Начальная температура ионов практически равна температуре атомов. Эта плазма является термически неравновесной и может быть неидеальной, если взаимодействие зарядов между собой на среднем расстоянии будет сравнимо или больше их кинетической энергии. Параметр неидеальности для взаимодействия электрон-ион может достигать единицы, а для взаимодействия ион-ион – десятки. Вырождение в этой плазме отсутствует и все процессы в ней рассматриваются классически. В работах [4–8] показано, что свойства этой плазмы, выраженные в безразмерном виде: такие как коэффициенты диффузии зарядов, проводимость, теплопроводность, вязкость, диэлектрическая проницаемость, коэффициенты преломления, поглощения, отражения, а также вероятность распределения ионного микрополя соответствуют любой классической неидеальной невырожденной плазме.

Еще один аспект интереса к исследованию УХП связан с физикой разлета этой плазмы в вакуум после ее создания. Вообще явление быстрого ускорения ионов при свободном расширении разреженной плазмы – одна из интересных особенностей кинетики плазмы. Оно было обнаружено еще в 1930 г. Танбергом [9] в импульсном газовом разряде. Качественное объяснение этого эффекта, основанное на механизме амбиполярного ускорения ионов электронами, было дано только в начале 1960-х гг. Плютто [10], а также Хенделем и Ребулом [11]. Оно состоит в том, что изза более высокой подвижности электронов создается электрическое (амбиполярное) поле, которое предотвращает вылет электронов и в то же время ускоряет ионы в направлении вакуума или менее плотной среды. В дальнейшем это явление наблюдали в поляр-

¹⁾e-mail: bzelener@mail.ru

ном ветре, в катодных вспышках, в вакуумных дугах, а также во взрывающихся проволоках, в лабораторной плазме, в лазерной искре. Кроме того, недавние эксперименты по созданию струй высокоэнергетических ионов от короткоимпульсного взаимодействия с твердотельными мишенями возродили интерес к описанию процесса свободного разлета плазмы в вакуум [12–17].

Новые возможности для изучения разлета плазмы в вакуум возникли с созданием УХП. Расширение УХП характеризуется хорошо контролируемыми начальными условиями и относительно медленной динамикой, что создает явные преимущества для изучения проблемы. Также УХП является классической в широком диапазоне параметров и может быть неидеальной, что дает возможность изучения влияния неидеальности на ее разлет. В настоящее время получен достаточно большой экспериментальный материал по расширению УХП различных элементов (Xe, Sr, Rb, Ca) [1, 2, 18, 19] в зависимости от плотности, числа частиц, начальных температур электронов и ионов.

Одним из лучших способов, позволяющих максимально точно и детально изучить процесс разлета УХП является его моделирование методом молекулярной динамики. В наших работах [20, 21] мы представили результаты, полученные прямым моделированием методом молекулярной динамики (ММД) процесса разлета двухкомпонентной плазмы в вакуум, происходящего при ее создании импульсным лазером, который выключается после ее возникновения. В работе [21] представлены результаты разлета сферического облака двухкомпонентной плазмы Sr в вакуум в широком диапазоне числа частиц, плотности и начальных температур электронов. Были последовательно рассмотрены все этапы разлета в зависимости от параметров плазмы. Показано, что, при всех рассмотренных условиях, имеет место одинаковый характер процесса разлета. После вылета быстрых электронов из облака плазмы избыточный положительный заряд локализуется на внешней границе в узком слое. Этот слой имеет характерную форму фронта с резким спадом концентрации заряда. По мере расширения плазмы скорость перемещения заряженного слоя становится постоянной и значительно превышает звуковую скорость ионов. При этом зависимость радиальной скорости ионов от радиуса имеет автомодельный характер задолго до финальной стадии разлета. На основе проведенных расчетов удалось определить зависимость всех характеристик разлета от числа частиц и других начальных параметров. Экстраполяция этих зависимостей на реальные эксперименты позволила провести сравнение различных экспериментальных данных с результатами моделирования. На основании результатов моделирования были сформулированы уравнения для функций распределения и получены автомодельные решения для различных этапов разлета.

Другой вариант создания УХП реализуется при использовании непрерывного ионизующего лазера [3]. В этом случае атомы, непрерывно поступающие и охлаждаемые в магнитооптической ловушке, непрерывно ионизуются. Так как заряды не удерживаются в ловушке, то они ее покидают с течением времени. Но за счет непрерывной ионизации в определенный момент времени, зависящий от начальной энергии электронов и ионов, а также от плотности плазмы, достаточно быстро устанавливается стационарное распределение частиц плазмы по плотности и температуре, которое может существовать в течение длительного времени. До настоящего времени этот режим подробно не исследовался.

В настоящей работе представлены некоторые результаты, выполненные ММД расчетов формирования УХП при ионизации непрерывным лазером. Так же, как и в случае разлета при создании плазмы импульсным лазером при стационарном режиме, образуется дисбаланс заряда, который формирует электрическое поле, удерживающее электроны и ускоряющее ионы. Напряженность поля в облаке плазмы при этом соответствует поведению напряженности поля однородно заряженного шара. Получено стационарное распределение частиц плазмы в зависимости от параметров. Показано отличие разлета частиц в стационарной плазме от разлета при импульсном способе ее создания.

Физическая модель. Для моделирования ММД образования стационарной ультрахолодной плазмы была использована следующая физическая модель. Возникновение заряженных частиц осуществлялось равномерно по паре зарядов (электрон и ион Ca⁴⁰) каждые 5 · 10⁻⁸ с. В нулевой момент времени скорости частиц обоих типов распределены по Максвеллу с заданной начальной кинетической энергией. Начальные координаты задаются так, что плотность частиц подчиняется нормальному закону распределения, дисперсия которого зависит от распределения интенсивности лазерного излучения. Для интегрирования уравнений движения используется схема Верле в скоростной форме. Минимальный шаг по времени при расчете движения электронов $\delta t =$ = 10⁻¹² с. Так как массы частиц существенно различаются, шаг по времени выбран различным для ионов и электронов (пропорционально корню квад-





Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость концентрации и
онов от радиуса и от времени: (a) – $\sigma = 0.02$ см; (b) – $\sigma = 0.07$ см.
Синие кружки – t = 10 мкс; красные треугольники – t = 30 мкс; фиолетовые квадраты – t = 180 мкс; черный пунктир – t = 220 мкс



Рис. 2. (Цветной онлайн) Разность чисел и
онов и электронов внутри сферы радиуса r в зависимости от времени: (a) –
 $\sigma = 0.02$ см: синий пунктир – r = 0.05 см; красная сплошная – r = 0.1 см; (b) – $\sigma = 0.07$ см: синий пунктир – r = 0.1 см;

красная сплошная – r = 0.2 см

ратному из отношения масс). Такой прием позволяет ускорить вычисления без ущерба для точности. При решении уравнений движения учитывалось кулоновское взаимодействие между частицами (все частицы со всеми). Так как число частиц в расчетах составляет больше 10000, то для уменьшения времени счета используется специально разработанный для настоящих расчетов алгоритм распараллеливания расчетов (*parallelization techniques*). В процессе расчетов обеспечивалось сохранение энергии с точностью до 1 %.

Влияние рекомбинации на результаты расчетов не существенно. Это связано с тем, что рекомбинация в ультрахолодной плазме носит столкновительный характер. Все остальные процессы рекомбина-

Письма в ЖЭТФ том 114 вып. 9-10 2021



Рис. 3. (Цветной онлайн) Напряженность электрического поля в зависимости от радиуса для разных моментов времени: (a) – $\sigma = 0.02$ см; (b) – $\sigma = 0.07$ см. Красная сплошная – t = 4 мкс; синий длинный пунктир – t = 10 мкс; бирюзовый штрих-пунктир – t = 90 мкс; черный короткий пунктир – t = 200 мкс. (c) – Безразмерные значения электрического поля E в зависимости от $\xi = r/\sigma_r$ ($\sigma_r = (\langle r^2 \rangle)^{1/2}$); $\int E(\xi)d\xi = 1$. Стационарный режим – $\sigma = 0.07$ см, t = 200 мкс – красная сплошная. Импульсный режим – синий пунктир



Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость кинетической энергии различных групп частиц, и потенциальной энергии, отнесенных к полной энергии, от времени: (a) – $\sigma = 0.02$ см; (b) – $\sigma = 0.07$ см. Красная сплошная линия – кинетическая энергия электронов плазмы E_{pe}/E ; синий штрих-пунктир – кинетическая энергия ионов плазмы E_i/E ; зеленая штриховая линия – кинетическая энергия свободных электронов, покинувших область плазмы $(E_e - E_{pe})/E$; черный пунктир – полная потенциальная энергия всех частиц U/E

ции в ней практически отсутствуют, так как концентрация зарядов составляет $n = 10^5 - 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-3}$, а температура электронов $T_e = 1 - 30$ К. При этом первоначальный захват электрона происходит на уровень энергии, равный $k_b T_e$ (k_b – постоянная Больцмана). Этому уровню энергии соответствует главное квантовое число в диапазоне k = 70-400. Вероятность радиационного перехода высоковозбужденных состояний в основное пропорционально k^{-5} и для этих состояний значительно меньше вероятности столкновительной рекомбинации. Вклад других рекомбинационных процессов мал из-за низкой концентрации частиц. Коэффициент трехчастичной рекомбинации был рассчитан нами методом молекулярной динамики для параметра неидеальности Γ_{ei} = $=e^2(4\pi n_i/3)^{1/3}/k_bT_e < 1.5$. Эти результаты, а также совпадающие с ними в этом диапазоне результаты работ других авторов приведены в [22]. В настоящей работе значение параметра неидеальности $\Gamma_{ei} \approx 0.1$. При его определении нужно учитывать то, что плотность электронов меняется с течением времени от нуля до некоторого значения, которое в несколько раз меньше плотности ионов при r = 0 за счет вылета электронов из облака плазмы. Для этого параметра неидеальности доля рекомбинировавших электронов на основании рассчитанного коэффициента рекомбинации составляет менее 1 % от количества электронов в стационарном состоянии при t = 200 мкс.

Рассмотрено два варианта, отличающиеся размером области, в которой происходит ионизация атомов. В обоих вариантах координаты возникающих частиц имеют гауссово распределение с дисперсиями $\sigma = 0.07$ см и 0.02 см.

Все эти условия выбирались на основании анализа экспериментальных данных [3].

Результаты. На рисунках 1–5 приведен пример расчетов для начальных температур электронов $T_{e0} = 5 \text{ K}$ и ионов $T_{i0} = 10^{-3} \text{ K}$. На рисунке 1 представлено распределение плотности ионов в зависимости от радиуса облака плазмы для разных значений времени и для двух значений размеров области ионизации $\sigma = 0.02 \text{ см}$ (рис. 1а) и $\sigma = 0.07 \text{ см}$ (рис. 1b). Из рисунка 1 видно, что установление стационарного режима наступает при $t \approx 200 \text{ мкс. Плотность ионов в центре достигает при заданных начальных условиях <math>n_i = 3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$ ($\sigma = 0.02 \text{ см}$) и $n_i = 10^5 \text{ см}^{-3}$ ($\sigma = 0.07 \text{ см}$), что примерно соответствует экспериментальным оценкам.

На рисунке 2 показана разность между числами ионов и электронов внутри сферы радиуса *r* в зави-



Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость кинетической энергии на одну частицу и средней температуры ионов от времени: (a) $\sigma = 0.02$ см; (b) – $\sigma = 0.07$ см. Красная сплошная линия – средняя температура ионов плазмы $\langle T_i \rangle$; синий штрих-пунктир – кинетическая энергия ионов плазмы $E_i(t)$

симости от времени для двух значений радиуса. С течением времени устанавливается постоянный дисбаланс заряда, что приводит к образованию стационарного электрического поля.

На рисунке 3a, b приведены результаты расчета напряженности электрического поля в зависимости от радиуса для разных моментов времени. Приведенные значения поля представляют собой усредненные по угловым координатам при фиксированном значении радиуса радиальные компоненты напряженности поля, рассчитанной как сумма вкладов всех заряженных частиц. Следует отметить немонотонное изменение напряженности поля с изменением времени. Вид кривых напряженности поля при различных моментах времени имеет подобный характер: монотонный рост при малых r после максимума сменяется спадом $1/r^2$. Такое поведение напряженности поля означает, что избыток заряда равномерно распределен внутри облака. Полученному распределению электрического поля соответствует потенциальная яма для электронов с глубиной, достигающей 10 К при $t \ge 150$ мкс, радиус которой можно оценить в 1 мм ($\sigma = 0.02$ см) и 2 мм ($\sigma = 0.07$ см). Электрическое поле ускоряет ионы плазмы и не позволяет оставшимся электронам покинуть плазменное облако.

В предыдущих работах [20, 21] моделировался разлет УХП при ее создании импульсным лазером.

Как было показано в этих работах, этот разлет осуществлялся также за счет образования дисбаланса заряда вследствие вылета части электронов. Однако формирование поля носило другой характер и приводило к образованию ионного фронта. На рисунке 3с представлены безразмерные значения электрического поля E в зависимости от $\xi = r/\sigma_r \ (\sigma_r = (\langle r^2 \rangle)^{1/2}),$ для установившегося стационарного режима и для варианта импульсной ионизации. Значения поля нормированы таким образом, что $\int E(\xi)d\xi = 1$. Различие в поведении электрического поля обусловлено тем, что в импульсном варианте избыточный заряд сосредоточен в узком слое на периферии плазмы, тогда как в стационарном случае заряд в области плазмы распределен равномерно. Как показано в работе [21], зависимость безразмерных значений электрического поля от параметра $\xi = r/\sigma_r$ практически одинакова в широком диапазоне определяющих параметров.

На рисунке 4 представлены все составляющие полной энергии системы.

На рисунке 4 представлены, в частности, зависимости кинетической энергии электронов плазмы и свободных электронов, отнесенные к полной энергии. Под свободными электронами понимаются те электроны, которые покинули облако плазмы и находятся на расстоянии большем, чем самый дальний ион. Кинетическая энергия электронов плазмы падает примерно в три раза за 200 мкс. Также на рис. 4 показана кинетическая энергия ионов, которая за 200 мкс за счет их ускорения полем сближается с энергией улетевших электронов. На рисунке 5 представлена зависимость кинетической энергии на одну частицу и средней температуры ионов от времени для двух размеров области ионизации. Как видно из этого рисунка, доля поступательной энергии в кинетической энергии ионов является подавляющей, а средняя температура ионов с течением времени остается примерно постоянной.

Заключение. Таким образом, при формировании стационарной УХП, происходящего в результате непрерывной ионизации лазерным излучением, в определенный момент времени, который зависит от начальной энергии электронов и ионов, а также от размера области ионизации σ , устанавливается стационарное распределение плотности и температуры частиц плазмы, которое может существовать в течение длительного времени. При этом плазма может быть в зависимости от параметров существенно неидеальна. Как следует из расчетов для расмотренных вариантов с разными размерами области, в которой происходит ионизация атомов, начальная кинетическая энергия электронов уменьшается в несколько раз, а температура ионов, несмотря на увеличение, остается достаточно низкой. Можно ожидать, что при определенных начальных условиях удастся получить значительные параметры неидеальности как для электронов так и для ионов. Полученные результаты пока недостаточны для того, чтобы определить зависимости всех характеристик формирования стационарной неидеальной плазмы от начальных параметров. Предполагается дальнейшее продолжение расчетов для формулировки на их основе этих зависимостей, а также для сравнения с экспериментом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант #18-12-00424). Работа также поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание #075-00460-21-00) в части разработки программы с использованием алгоритмов параллельных вычислений для проведения расчетов в Объединенном суперкомпьютерном центре РАН.

Авторы выражают благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

- T. S. Killian, T. Pattard, T. Pohl, and J. M. Rost, Phys. Rep. 449, 7 (2007).
- M. Lyon and S. L. Rolston, Rep. Prog. Phys. 80, 017001 (2017).
- Б. Б. Зеленер, Е. В. Вильшанская, С. А. Саакян,
 В. А. Саутенков, Б. В. Зеленер, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ 113, 92 (2021).
- A. A. Bobrov, A. M. Bunkov, S. Ya. Bronin, A. B. Klyarfeld, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Plasmas 6, 082102 (2019).
- T. S. Strickler, T. K. Langin, P. McQuillen, J. Daligault, and T. C. Killian, Phys. Rev. X 6, 021021(2016).
- A. A. Bobrov, A. M. Bunkov, S. Ya. Bronin, A. B. Klyarfeld, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Plasmas 27, 010701 (2020).
- A. A. Bobrov, S. Ya. Bronin, D. S. Korchagin, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Plasmas 27, 122103 (2020).
- S. Ya. Bronin, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 268, 107621 (2021).
- 9. R. Tanberg, Phys. Rev. 35, 1080 (1930).
- 10. A.A. Plyutto, ЖЭТФ **39**, 15891 (1960).
- H. W. Hendel and T. T. Reboul, Phys. Fluids 5, 360 (1962).
- 12. P. Mora, Phys. Rev. E **91**, 013107 (2015).
- 13. C. Sack and H. Schamel, Phys. Rep. 156, 311 (1987).
- 14. P. Mora, Phys. Plasmas 12, 112102 (2005).
- D. Bennaceur-Doumaz, D. Bara, E. Benkhelifa, and M. Djebli, J. Appl. Phys. **117**, 043303 (2015).
- I. S. Elkamash and I. Kourakis, Phys. Rev. E 94, 053202 (2016).
- 17. Y. Hu and J. Wang, Phys. Rev. E 98, 023204 (2018).
- T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson, L. A. Orozco, C. Orzel, and S. L. Rolston, Phys. Rev. Lett. 83, 4776 (1999).
- M. K. Warrens, G. M. Gorman, S. J. Bradshaw, and T. C. Killian, Phys. Plasmas 28, 022110 (2021).
- E. V. Vikhrov, S. Ya. Bronin, A. B. Klyarfeld, B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Plasmas 27, 127702 (2020).
- E. V. Vikhrov, S. Ya. Bronin, A. B. Klyarfeld,
 B. B. Zelener, and B. V. Zelener, Phys. Rev. E 104, 015212 (2021).
- A. A. Bobrov, B. B. Zelener, B. V. Zelener, and D. R. Khikhlukha, High Temp. 51, 615 (2013).