

УДК 533.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОГО ПЛАЗМЕННОГО МИКРОПОЛЯ

А. А. Белов^{1,2,*}, член-корреспондент РАН Н. Н. Калиткин^{3,**}

Поступило 12.07.2019 г.

Оптические свойства плазмы определяются наличием в ней флуктуирующего микроскопического электрического поля. В работе на основе первых принципов построена простая модель плазменного микрополя, впервые учитывающая его неоднородность по октупольный член включительно. Сравнение с экспериментами показало, что только эта модель микрополя правильно описывает наблюдаемое число линий в спектральных сериях.

Ключевые слова: плазменное микрополе, эффект Штарка, число спектральных линий.

DOI: <https://doi.org/10.31857/S0869-5652489122-26>

1. Проблема. Моделирование актуальных задач воздействия лазерного излучения на вещество и 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, порождённое 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.

Изучение микрополя начал Хольцмарк [1]. Он построил функцию распределения $p(E)$ напряжённости микрополя E для разреженной плазмы. Вид этого распределения приведён на рис. 1, где для напряжённости E выбран характерный масштаб Z/R^2 ; здесь Z — усреднённый заряд всех сортов частиц, R — радиус сферизованной атомной ячейки. Однако распределение Хольцмарка имело медленно убывающий “хвост” $p(E) \sim E^{-5/2}$ при $E \rightarrow \infty$. Поэтому плотность энергии $\sim \langle E^2 \rangle$ оказывалась бесконечной, этим распределением нельзя пользоваться в районе “хвоста”.

В 1980-е годы группа Иглесиаса (Лос-Аламос) построила модели $p(E)$ для плотной плазмы [2, 3]. При высоких плотностях распределения сильно отличались от хольцмарковского. Однако в них сохранялся тот же принципиальный недостаток — медленно убывающие “хвосты” и бесконечная плотность энергии.

Для сверхвысоких плотностей в Лос-Аламосе ещё ранее была разработана модель SHO (Simple Harmonic Oscillators) [4]. В ней “хвосты” распределения были быстро затухающими (см. рис. 1, кривая 2), так что плотность энергии оказывалась конечной. Однако модель содержала странную зависимость распределения от температуры: при $T \rightarrow 0$ максимум распределения неограниченно сдвигался в сторону больших E . Это нефизично, и модель не внушает доверия.

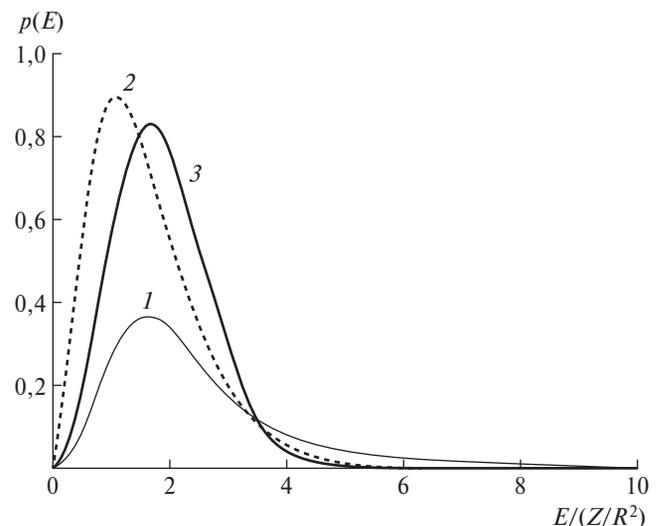


Рис. 1. Функции распределения микрополя: 1 — по Хольцмарку, 2 — модель SHO, 3 — модель QUIP.

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Российский университет дружбы народов, Москва

³Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской Академии наук, Москва

*E-mail: aa.belov@physics.msu.ru

**E-mail: kalitkin@imamod.ru

В 1990-е годы И.О. Голосной выполнил цикл работ по усовершенствованию моделей Иглесиаса [5, 6]. Использовались достаточно сложные модели, а результаты были промежуточными между распределением Хольцмарка и ШНО. Поэтому данное направление нельзя считать удачным.

Таким образом, для полноценного описания микрополя потребовались новые подходы, начатые в [7–9] в предположении пространственной однородности микрополя. Однако ясно, что микрополе не может быть пространственно однородным: мгновенные значения напряжённости поля в различных точках пространства неодинаковы. Ниже изложено обобщение этих подходов на случай неоднородного микрополя.

2. Пространственная неоднородность. Модель QUIP (*Quasi-independent particles*). Кулоновские силы являются дальнедействующими. Как известно, системы с таким взаимодействием неустойчивы, а методы их строгого расчёта не созданы. Поэтому возможны лишь модели.

При достаточно высоких температурах кинетическая энергия заряженных частиц будет существенно превосходить потенциальную энергию взаимодействия. Тогда разумной представляется модель квазинезависимых частиц QUIP. В ней предполагается, что корреляциями взаимного расположения движущихся зарядов можно пренебречь. Рассмотрим расчёт плазменного микрополя в этой модели.

Моменты микрополя. Точку, в которой ищем поле, выберем за начало координат. Будем 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

$$\sum Z_j = 0. \quad (1)$$

Нам нужны характеристики поля в точке \mathbf{r} вблизи начала координат. Каждый заряд создаёт в этой точке потенциал $\Phi_j = \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|}$. Поэтому полный потенциал

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|}. \quad (2)$$

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

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx \Phi(0) + (\mathbf{E}, \mathbf{r}) + \frac{1}{2}(\mathbf{r}, U\mathbf{r}) + \frac{1}{6}W\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots \quad (3)$$

Здесь скаляр $\Phi(0)$, вектор электрического поля \mathbf{E} и матрица U имеют следующий вид:

$$\Phi(0) = \sum \frac{Z_j}{r_j}, \quad \mathbf{E} = \sum \frac{Z_j}{r_j^3 \{x_j, y_j, z_j\}}, \quad (4)$$

$$U = \sum \frac{Z_j}{r_j^5 u}, \quad r_j = \sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2},$$

$$u = \begin{pmatrix} 3x_j^2 - r_j^2 & 3x_j y_j & 3x_j z_j \\ 3x_j y_j & 3y_j^2 - r_j^2 & 3y_j z_j \\ 3x_j z_j & 3y_j z_j & 3z_j^2 - r_j^2 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Тензор W не приводим ввиду громоздкости. Во всех предшествующих работах рассматривалась только напряжённость \mathbf{E} .

Отметим, что все три компоненты вектора \mathbf{E} независимы. Матрица U симметрична и $\text{Tr} U = 0$, поэтому матрица имеет пять независимых компонент. Из 27 компонент симметричного тензора W независимы только 10.

Распределение моментов. Согласно модели QUIP, положения j -х частиц принимаются взаимно независимыми в сферизованной атомной ячейке радиуса R . Тогда для нахождения функции распределения величин (4), (5) можно использовать закон больших чисел. Это приводит к следующим закономерностям. Скалярный потенциал $\Phi(0)$ имеет гауссову функцию распределения с масштабом $\Phi_0 = C_\Phi \frac{Z}{R}$. Каждая из компонент вектора \mathbf{E} имеет гауссово распределение с масштабом $E_0 = C_E \frac{Z}{R^2}$, а длина вектора \mathbf{E} имеет максвелловское распределение. При этом компоненты E_i не коррелированы ни между собой, ни со скалярами $\Phi(0)$ или E . Компоненты U_{ij} также распределены по Гауссу с масштабом $U_0 = C_U \frac{Z}{R^3}$ и не коррелированы с величинами $\Phi(0)$ и \mathbf{E} . Константы C_Φ, C_E, C_U подлежат определению.

Определение коэффициентов. Вычислим $\Phi^2(0)$ из (4) и усредним по независимым равномерно распределённым \mathbf{r}_j , учитывая условие электронейтральности (1). Это даёт

$$D\Phi = \frac{3}{4} \frac{Z_D^2}{R^2}, \quad C_\Phi = \sqrt{\frac{3}{2}}, \quad (6)$$

где эффективный заряд определяется как

$$Z_D = \left(\xi_e + \sum \xi_j Z_j^2 \right)^{1/2}. \quad (7)$$

Здесь ξ_j, ξ_e — относительные концентрации ионов и электронов соответственно. Таким образом, константа C_Φ определена из первых принципов.

Отметим, что эффективный заряд (6) определяется по формуле Дебая и не совпадает с общепотребительной формулой Хольцмарка

$$Z_H = \left(\xi_e + \sum \xi_j Z_j^{3/2} \right)^{2/3}. \quad (8)$$

Однако различие этих зарядов невелико:

$$Z_D < Z_H < 1,18 Z_D.$$

Из первых принципов можно показать, что в масштабные множители остальных компонент также входит Z_D . Однако для нахождения численных коэффициентов C_E, \dots нужны дополнительные соображения. Запишем мгновенное значение неоднородного электрического поля в точке \mathbf{r} :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(0) + U(0)\mathbf{r} + \frac{1}{2}W\mathbf{r}\mathbf{r} + \dots, \quad r \leq R. \quad (9)$$

Локальная плотность энергии, усреднённая по углам, пропорциональна

$$\frac{Z_D^2}{R^4} \left(C_E^2 + C_U^2 \frac{r^2}{R^2} + \frac{C_W^2}{4} \frac{r^4}{R^4} + \dots \right), \quad r \leq R. \quad (10)$$

Энергия электрического поля во всей ячейке равна

$$\frac{Z_D^2}{4R} \left(C_E^2 + \frac{1}{3}C_U^2 + \frac{1}{10}C_W^2 + \dots \right). \quad (11)$$

Плотность энергии (10) не может быть бесконечной. Поэтому ряд (10) должен сходиться при $r \leq R$.

Примем естественную гипотезу $\frac{C_U}{C_E} \approx \frac{C_W}{C_U} \approx \dots \approx q < 1$. Тогда энергия поля (11) примерно равна

$$\frac{3C_E^2}{4(3 - q^2)}. \quad (12)$$

Потребуем, чтобы: 1) энергия (12) равнялась потенциальной энергии однородного электронного газа $\frac{0,9Z_D^2}{R}$; 2) положение максимума распределения $p(E)$ совпадало с хольцмарковским на рис. 1. Это достигается при

$$q = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad C_E = \sqrt{\frac{14}{5}}, \quad C_U = \sqrt{\frac{28}{15}}, \quad C_W = \sqrt{\frac{56}{45}}, \dots \quad (13)$$

Соответствующее распределение напряжённости показано на рис. 1. Оно близко к распределению Хольцмарка в районе максимума, но имеет быстро затухающий “хвост”, что является физически более правильным.

Заметим, что ряд для полной энергии (11) сходится быстро. Поэтому более высокие мультиполи практически не влияют на значения коэффициентов. Однако ряд для локальной плотности медленно сходится при $r \sim R$. Поэтому микрополе можно считать однородным лишь при $r^2 \ll R^2$ (реально при $r < 0,3R$). Это показывает, что учёт неоднородности микрополя необходим.

3. Аprobация модели. *Эксперименты.* Надёжной аprobацией 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 г. в Лаборатории физики плазмы Университета Рочестера (Нью-Йорк) совместно с ядерными центрами США проводились уникальные эксперименты по спектрам лазерной плазмы (см. [10, 11] и цитированную литературу). В них сферическая оболочка диаметром 0,1–1,0 мм наполнялась смесью Ag, Kг 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 Ag, а также ионы Kг с *L*-оболочкой.

Измеряются рентгеновские спектры этих ионов в диапазоне 2,9–4,2 кэВ (рис. 2). Эти спектры показывают не мгновенное состояние, а являются интегралом по всему времени свечения мишени. Зна-

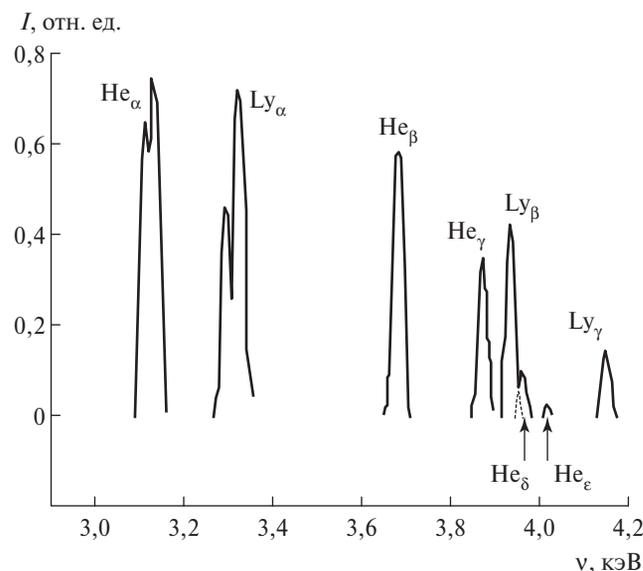


Рис. 2. Рентгеновский спектр лазерной плазмы в эксперименте [10, 11].

чение ширины линий достигают ~50 эВ. В серии гелиеподобного иона Ag^{+16} хорошо видны первые три линии. Четвёртая довольно слаба, а пятая — еле заметна. Эксперименты [10, 11] наиболее ценны, поскольку представленные спектры содержат все наблюдаемые линии одной серии.

Интенсивность каждой линии определяется через площадь её контура на рис. 2. 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 расчёта. Однако применимость существующих газодинамических кодов к микромишам вызывает сомнения. Это существенно затрудняет интерпретацию эксперимента. Чтобы исключить трудно вычисляемые факторы, будем нормировать все интенсивности на интенсивность первой линии. Нормированные интенсивности представлены на рис. 3.

Интерпретация. Линии серии соответствуют переходам с возбуждённых уровней на основной. Рассмотрим факторы, определяющие интенсивность линии.

Во-первых, электронные уровни обрезаются линейной компонентой микрополя. Когда мгновенный линейный потенциал микрополя накладывается на кулоновскую яму (рис. 4), то суммарное поле имеет седловую точку. Сохраняются только уровни, лежащие ниже седловой точки. Для определения вероятности сохранения уровня необходимо провести интегрирование по функции распределения напряжённости. Теория этого эффекта изложена

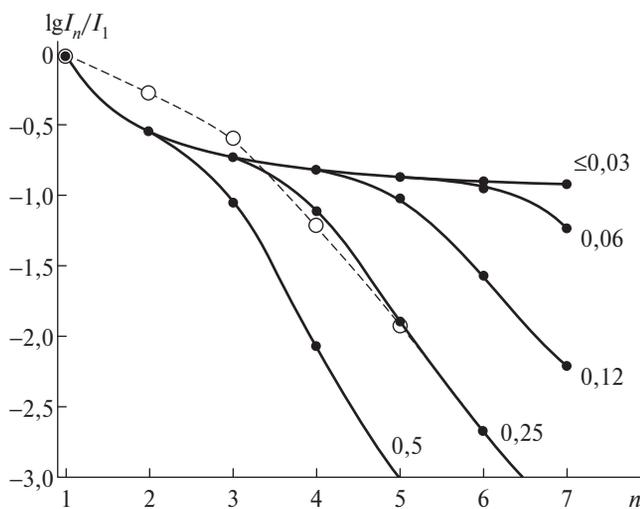


Рис. 3. Относительные интенсивности: 1 — эксперимент [10, 11], 2 — данная модель. Цифры около линий — плотность, $г/см^3$.

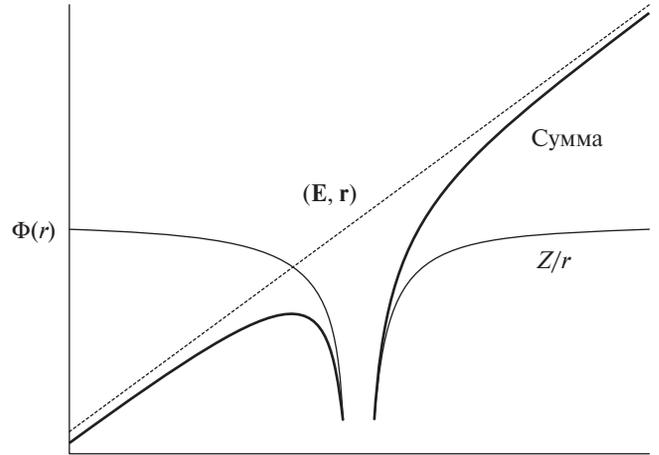


Рис. 4. Кулоновская яма с микрополем.

в [7–9]. 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.

Во-вторых, заселённости уменьшаются за счёт больцмановского фактора $\exp\left(-\frac{\epsilon}{T}\right)$, 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 [12]. Эта вероятность определяется через интеграл от радиуса-вектора, свёрнутого с волновыми функциями начального и конечного состояний. В сильно разреженной плазме эти волновые функции можно считать водородоподобными. Эти расчёты весьма сложны и приведены в [13, 14], причём результаты этих двух источников не согласуются между собой. Для плотной плазмы лазерных мишеней это приближение уже не справедливо, что не позволяет надёжно рассчитать этот фактор.

Мы провели расчёты ослабления линий, принимая для мишени ту температуру $T \approx 0,4$ кэВ, при которой максимальна концентрация ионов Ag^{+16} (при более высоких или более низких температурах резко уменьшается концентрация этих ионов и соответственно светимость линий). Неизвестную среднюю плотность мишени мы варьировали в широких пределах.

На рис. 3 показаны относительные интенсивности линий при учёте микрополевого обрезания и больцмановского фактора (силы осциллятора мы не включали ввиду ненадёжности их расчёта). Видно, что наилучшее согласие с экспериментом получилось при $\rho \approx 0,25$ $г/см^3$. При увеличении плот-

ности слишком велико микрополевое обрезание. При уменьшении плотности теория предсказывает чрезмерное количество линий. Таким образом, построенная модель разумно описывает экспериментальные данные.

4. **Заключение.** В зарубежных работах [10, 11] и ряде других делались попытки теоретически объяснить наблюдаемые спектры. Однако в этих работах не было сделано ни одного расчёта относительных интенсивностей всех линий спектральной серии. В них лишь индивидуально описывались контуры отдельных линий. При этом для каждой линии подбиралось своё значение плотности, и значения плотностей для разных линий сильно отличались друг от друга, что необъяснимо с физической точки зрения.

Поэтому предложенная здесь модель лучше описывает эксперимент, чем другие работы. Это является удовлетворительной апробацией модели и показывает, что её можно использовать для расчёта оптических свойств лазерных термоядерных мишеней.

Таблицы, описывающие состояние микрополя, будут включены в базу данных ТЕФИС. Эта база создаётся в Институте прикладной математики им. 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 расчётах мишеней управляемого термоядерного синтеза и большого числа других конструкций.

Источник финансирования. Работа поддержана грантом РНФ 16–11–10001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Holtmark J.* // *Ann. Phys.* 1919. V. 58. P. 577.
2. *Iglesias C.A., Lebowitz J.T.* // *Phys. Rev. A.* 1984. V. 30. P. 2001.
3. *Iglesias C.A., DeWitt H.E., Lebowitz J.T., et al.* // *Phys. Rev. A.* 1985. V. 31. P. 1698.
4. *Broyles A.A.* // *Phys. Rev.* 1955. V. 100. P. 1181.
5. *Голосной И.О.* // *Матем. моделир.* 1991. Т. 3. № 9. С. 49.
6. *Голосной И.О.* // *Матем. моделир.* 1992. Т. 4. № 6. С. 3.
7. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* // *ДАН.* 2006. Т. 411. № 1. С. 36.
8. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* // *ДАН.* 2008. Т. 418. № 5. С. 614.
9. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* // *Физика плазмы.* 2011. Т. 37. № 2. С. 214.
10. *Hooper F., Jr., Mancini R.C., Kilcrease D.P., et al.* // *SPIE. High Intensity Laser-Matter Interactions.* 1988. V. 913. P. 129.
11. *Burris-Mog T.J., Mancini R.C., Bailey J.E., et al.* // *J. Quantitative Spectr. and Radiat. Transfer.* 2006. V. 99. P. 120.
12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* *Квантовая механика.* 6-е изд. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
13. *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.
14. *Лисица В.С.* *Введение в нанооптику.* М.: МФТИ, 2012. 159 с.

SIMULATION OF HETEROGENEOUS PLASMA MICROFIELD

A. A. Belov^{1,2}, Corresponding Member of the RAS N. N. Kalitkin³

¹*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

²*Peoples Friendship University of Russia, Moscow, Russian Federation*

³*Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Received July 12, 2019

Optical properties of plasma are determined by presence of fluctuating micro-scopic electric field. In the present work, we construct a simple ab initio model of plasma microfield accounting for its heterogeneity up to octupole term for the first time. Comparison with experiments shows that only this model describes the observed number of spectral lines.

Keywords: plasma microfield, Stark effect, number of spectral lines.