

ФЛУКТУАЦИИ ДАВЛЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ: ПРЕДВЕСТНИК ПЛАЗМЕННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

А.В. Ланкин^{1,2}, Г.Э. Норман^{1,2}, И.М. Саитов^{1,2}

¹Объединённый институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Ижорская ул., 30/19

²Московский физико-технический институт (ГУ)
141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9

Аннотация

Флуктуации давления в неидеальной плазме исследуются в рамках флуктуационного подхода, позволяющего проводить совместное самосогласованное описание свободных и слабосвязанных состояний. Используется классический метод молекулярной динамики. Для описания электрон-ионного взаимодействия используется кулоновский потенциал, обрезанный на глубине потенциальной ямы. Данный потенциал не зависит от температуры и плотности частиц. При использовании химической модели для расчетов термодинамических функций неидеальной частично ионизованной плазмы, существует необходимость учета дополнительного эффективного отталкивания, обусловленного зависимостью границы обрезания дискретного спектра от плотности частиц. Данная эффективная сила подавляет термодинамическую неустойчивость в неидеальной плазме, являясь стабилизирующим фактором. Используемый в данной работе подход свободен от особенности химической модели, связанной с раздельным описанием свободных и связанных состояний, и учитывает вышеупомянутое эффективное отталкивание в неявной форме. При анализе флуктуаций давления была обнаружена область параметров плазмы, в которой функция распределения давления может быть довольно точно описана суперпозицией двух нормальных распределений. Данная область параметров находится вне области действия вышеупомянутого стабилизирующего фактора. Таким образом, данный результат может служить косвенным указанием на существование двухфазной области в заданном диапазоне параметров плазмы.

PRESSURE FLUCTUATIONS IN NONIDEAL PLASMA: PRECURSOR OF THE PLASMA PHASE TRANSITION

Fluctuations of pressure of singly ionized nonideal plasma are studied using the fluctuation approach which provides the self-consistent joint description of free and weakly bound electron states. The classical molecular dynamics method is used. The electron-ion interaction is described by the density- and temperature-independent cutoff Coulomb potential. The results for partially ionized plasma are related to the Gryaznov–Iosilevsky effective repulsion which could suppress the thermodynamic plasma instability. The fully ionized plasma region is found where pressure fluctuation distribution can be approximated by the superposition of two Gauss distribution functions. It could be considered as a precursor of the plasma phase transition.

1. ВВЕДЕНИЕ

Предположение о плазменном фазовом переходе было выдвинуто в [1,2] по аналогии с уравнением Ван-дер-Ваальса, в котором фазовый переход первого рода возникает в результате конкуренции дальнегодействующего притяжения и короткодействующего отталкивания. Вопрос о существовании данного фазового перехода остается открытым, хотя существует ряд экспериментальных данных, которые могут служить косвенным подтверждением данного явления.

Силы отталкивания в газе Ван-дер-Ваальса обусловлены конечными размерами частиц, вследствие чего данные силы являются короткодействующими. Притяжение молекул может осуществляться вследствие диполь-дипольного взаимодействия. Следует, однако, заметить, что потенциал взаимодействия между молекулами $U(r)$ должен довольно быстро убывать с расстоянием, причем асимптотически $U(r) \sim r^{-n}$, где $n > 3$. Переход метастабильной фазы вещества в устойчивую совершается путем флуктуационного возникновения в однородной среде скопления новой фазы – зародышей. Однако эффект появления поверхности раздела фаз является энергетически невыгодным, что приводит к тому, что при не достаточно больших

размерах зародыша, он оказывается неустойчивым и исчезает. Таким образом, образование новой фазы возможно только в случае превышения размера зародыша некоторого критического значения. Начало фазового перехода определяется вероятностью возникновения критических зародышей.

Из выражения для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса видно, что при определенных значениях температуры ниже некоторого критического значения, возникает область давлений и плотностей, характеризующихся положительным значением производной давления по объему $(\partial P/\partial V)_T > 0$, что противоречит условиям термодинамической устойчивости. Таким образом, равновесное состояние при данных термодинамических параметрах возможно только в случае неоднородности вещества, т.е. образования двухфазной области. В случае если рассматриваемая система – плазма, сила взаимодействия между частицами, в силу того, что они обладают зарядом, обусловлена кулоновским потенциалом. Кулоновское взаимодействие между зарядами является дальнедействующим и, в силу поляризации их расположения в плазме, имеет в целом характер притяжения. Эффективное отталкивание на малых расстояниях возникает даже между разноименно заряженными частицами вследствие кванто-

вых эффектов. При этом эффект квантового отталкивания и учет связанных состояний существенен в системах, в которых величина энергии межчастичного взаимодействия сопоставима с энергиями теплового движения частиц, т.е. в случае неидеальной плазмы. В разреженной плазме конфигурации со сблизившимися частицами маловероятны. Таким образом, неидеальная плазма, рассматриваемая в [1,2] может являться аналогией газу Ван-дер-Ваальса. Однако отличием данной системы является то, что система взаимодействующих частиц двух компонентная, причем концентрации разноименных зарядов одинаковы, что обеспечивает электронейтральность рассматриваемой системы заряженных частиц. При этом присутствует третья компонента – нейтральные атомы, рассматриваемые в [1, 2] как идеальный газ.

В работах [3, 4] при рассмотрении термодинамических функций неидеальной плазмы в рамках химической модели было учтено, что присутствующие в системе возбужденные атомы не могут рассматриваться как идеальный газ.

Ограничение дискретного спектра в статистической сумме атома зависит от концентрации зарядов. Грязнов и Иосилевский [3, 4] обратили внимание на то, что эта зависимость приводит к появлению в уравнении состояния нового слагаемого, имеющего характер эффективного отталкивания. В данном случае статистическая сумма атома Z имеет следующий вид:

$$Z = \sum_{s=s_0}^{s_{\max}} g_s \exp\left(-\frac{E_s}{kT}\right), \quad (1)$$

где s_0 – главное квантовое число основного состояния ($E_{s_0} = 0$); g_s и E_s статистический вес и энергия уровня s . Зависимость s_{\max} от плотности зарядов n_e приводит к необходимости учета поправок ко всем термодинамическим функциям, содержащим производные $\partial Z[s_{\max}(n_e)]/\partial s_{\max}$ [3, 4]. Учет данных поправок приводит к возникновению дополнительного отталкивания. Данный фактор является стабилизирующим.

Недостатком использования химической модели является необходимость отдельного описания состояний, характеризующих дискретным и непрерывным спектром, что приводит к несогласованности термодинамических функций. Более последовательным представляется применение флуктуационного подхода [5], позволяющего производить совместное самосогласованное описание свободных и слабосвязанных состояний, вследствие чего данный подход свободен от особенности химической модели. В данном подходе фактор Грязнова–Иосилевского учитывается в неявной форме.

В данной работе получены флуктуации давления в неидеальной плазме. Диапазон изменения параметра неидеальности $0.1 \leq \Gamma = (4\pi n_e/3)^{1/3} e^2/kT \leq 2$, e – заряд электрона, k – константа Больцмана. Обнаружена область параметров плазмы $n_e - T$, в которой распределение флуктуаций давления не может быть описано функцией распределения Гаусса. Следует заметить, что данная область параметров находится вне области действия вышеупомянутого стабилизирующего фактора.

2. МОДЕЛЬ ПЛАЗМЫ. МЕТОД РАСЧЕТА. РЕЗУЛЬТАТЫ

2.1. Модель плазмы

Рассматривается невырожденная система, состоящая из однократно заряженных частиц: электронов и ионов, с массами m и M соответственно. Отношение масс выбрано равным $M/m = 100$, так как при значениях $M/m \geq 100$ данный параметр не влияет на электронные свойства плазмы [5, 6]. Число частиц в рассматриваемой системе $N = 1000$, что достаточно для описания неидеальной плазмы [5, 6].

2.2. Метод расчета флуктуаций давления

Используется классический метод молекулярной динамики. Так же как и в [5] используется потенциал $U(r)$, совпадающий с кулоновским на расстояниях $r > r_0 = e^2/E_0$, и равный $-E_0$ при $r < r_0$. Исследовалась зависимость полученных результатов от глубины потенциальной ямы E_0 . Данный потенциал не зависит от температуры и плотности. Зависимость потенциала от температуры означает зависимость от скоростей частиц, таким образом система с данным потенциалом взаимодействия не является гамильтоновой. Попытка использования зависящего от скорости потенциала для расчета уравнения движения приведет к нарушению закона сохранения энергии. Используемый в данном подходе потенциал позволяет совместно описывать свободные и связанные состояния.

Следует заметить, что в рамках классического метода молекулярной динамики возможно исследование состояний обладающих непрерывным спектром, вследствие чего возможно рассмотрение только высоко возбужденных электронных состояний в атоме, обладающих квазинепрерывным спектром, и свободных состояний.

Расчет флуктуаций давления проводился по следующему алгоритму. Рассчитывались траектории всех частиц в равновесной плазме в течение полного времени моделирования. Мгновенное значение давления P вычислялось по формуле

$$P = \frac{2}{3V} \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2} - \frac{1}{3V} \sum_{i,j=1,N}^{i>j} r_{ij} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \quad (2)$$

где m_i и v_i – масса и скорость i -й частицы; r_{ij} – межчастичное расстояние. Флуктуации давления ΔP рассчитывались как $\Delta P = P - P_{av}$, где P_{av} – усредненное по равновесным конфигурациям значение давления.

2.3. Результаты

На рис. 1 (a–d) показаны полученные функции распределения флуктуаций давления $f(\Delta P)$ при различных значениях плотности и постоянной температуре.

Видно, что при увеличении плотности частиц возникает область параметров плазмы, в которой функция распределения давления имеет ярко выраженную асимметричную форму и не может быть описана нормальным распределением, соответствующим полученным данным.

Данный эффект возникает так же и при различных температурах и фиксированной плотности, как это видно из рис. 1 (e–h). Следует так же заметить, что

первая производная функции распределения давления отлична от нуля при $\Delta P = 0$.

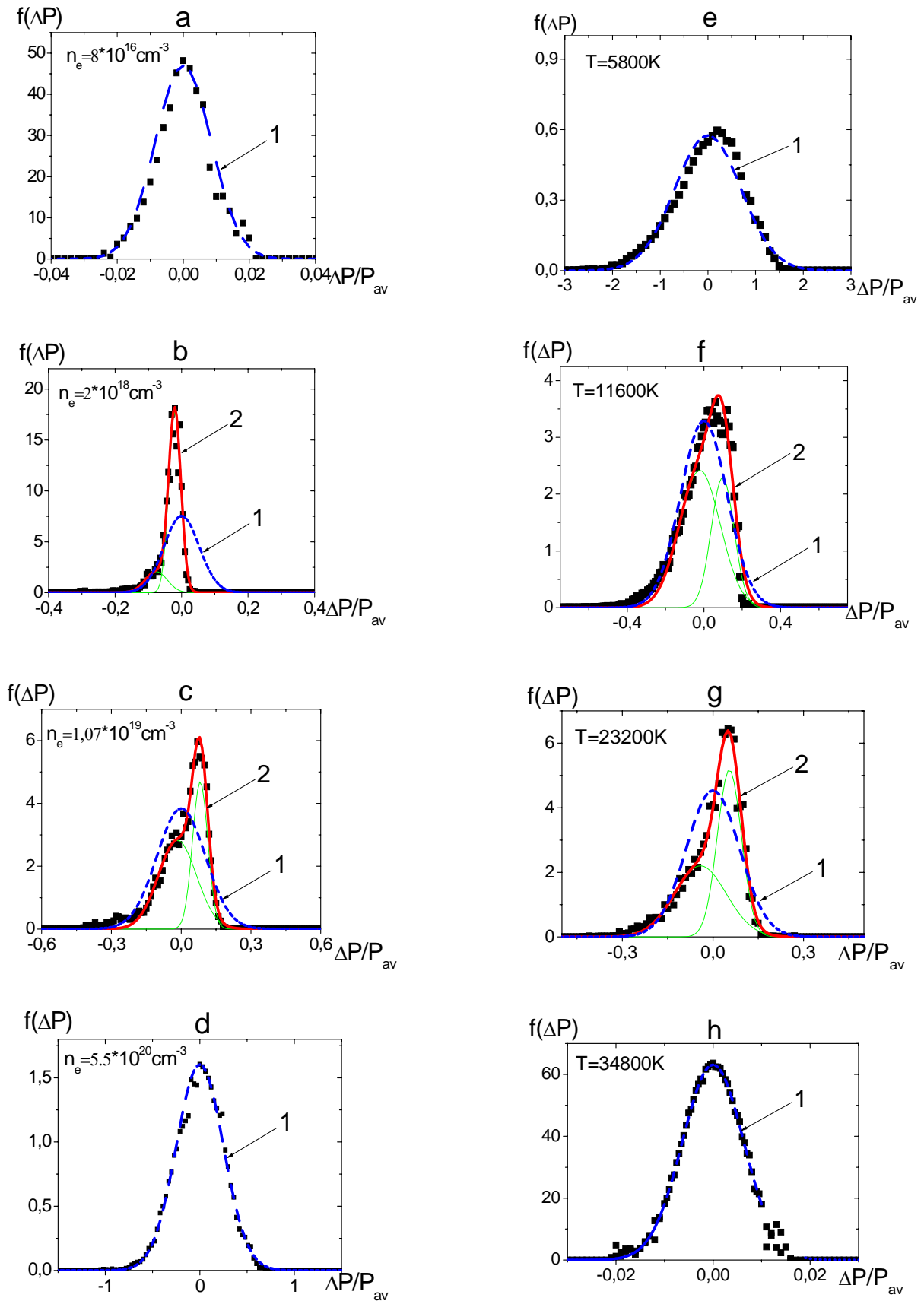


Рис. 1. Распределение флуктуаций давления при постоянной: (a-d) температуре $T = 11600 \text{ K}$; (e-h) концентрации частиц $n_e = 1.6 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; 1 – функция распределения Гаусса; 2 – суперпозиция двух нормальных распределений; P_{av} – среднее значение давления

В данной области температур и плотностей частиц были рассчитаны значения второго $\sigma_2 = \sqrt{\langle \Delta P^2 \rangle}$ и третьего $\sigma_3 = \sqrt[3]{\langle \Delta P^3 \rangle}$ моментов функции распределения флуктуаций давления. Значение σ_3 отлично от нуля, что является дополнительным подтверждением того, что полученные функции распределения не могут быть описаны нормальным распределением. При этом значение третьего момента отрицательно и сопоставимо со значением второго. Таким образом, коэффициент асимметрии отрицателен, что указывает на то, что левый хвост распределения длиннее правого, что можно видеть на рис. 1.

На рис. 2 представлены зависимости второго и третьего моментов функции распределения, отнесенные к среднему значению давления, в зависимости от параметра неидеальности.

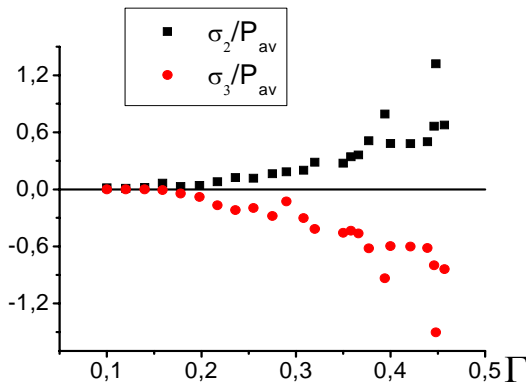


Рис. 2. Второй и третий момент функции распределения при $T = 11600$ К

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В большинстве случаев флуктуации термодинамических величин характеризуются гауссовым распределением [7, 8]. Действительно, в общем случае вероятность термодинамической флуктуации вблизи точки равновесия описывается соотношением

$$f(\Delta x) \sim \exp(\Delta S(\Delta x)/k) \quad (3)$$

где Δx – отклонение термодинамической величины от равновесного значения, $\Delta S(\Delta x)$ – отклонение энтропии от равновесного значения в зависимости от величины флуктуации. Полагая энтропию аналитической функцией и учитывая, что точка равновесия соответствует точке её максимума она может быть представлена в виде степенного ряда: $\Delta S(\Delta x) = a_2 \Delta x^2 + a_3 \Delta x^3 + a_4 \Delta x^4 + \dots$, второго член, которого с учётом (3) и даёт Гауссово распределение при малой величине отклонения флуктуирующей величины от равновесного значения. В более общем случае можно предположить случай, когда в ноль обращаются все члены разложения вплоть до l -го. Тогда, очевидно, что первый отличный от нуля член не может быть нечётным, действительно, если первый отличный от нуля член оказывается нечётным, то энтропия может быть представлена как $\Delta S(\Delta x) = a_l \Delta x^l (1 + o(1))$, а значит существует окрестность равновесного значения

$(-\delta; 0)$ где отклонение энтропии имеет отрицательное значение и окрестность $(0; \delta)$ – где положительное, что противоречит тому, что в система находится в состоянии равновесия.

Таким образом, для произвольной системы находящейся в равновесии распределение флуктуаций вблизи положения равновесия может быть описано как $f(\Delta x) \sim \exp(a_l \Delta x^l / k)$, где l – чётное. Откуда очевидным образом следует, что какова бы ни была однородная система, находящаяся в равновесии, и термодинамическая величина её характеризующая, распределение малых флуктуаций этой величины всегда будет иметь симметричный характер относительно её среднего значения.

Таким образом, поскольку в неидеальной плазме мы чётко наблюдаем несимметричный характер распределения флуктуаций относительно среднего значения, то можно предположить возможность того, что рассматриваемая система становится неоднородной, и в ней присутствуют две независимые подсистемы различных фаз имеющие за счёт поверхностного натяжения слегка различающиеся давления наложения флуктуаций давлений которых и создаёт эффект несимметричного распределения флуктуаций. Такая интерпретация, кроме того, подтверждается возможностью представления наблюдаемых распределений с помощью двух гауссовых распределений средние значения которых смещены друг относительно друга. Рассмотрена зависимость разности средних значений функций распределения Гаусса δP при фиксированном значении температуры $T = 11600$ К от плотности. Получена аппроксимация для величины $\delta P \sim n_e^{0.9}$.

Как видно из рис. 3 область “аномального” поведения функции распределения давления существует только при значениях $T \leq 3$ eV (34800 К) и $n_e \leq 10^{21}$ см⁻³. Вид рисунка 3 не зависит от выбора параметра E_0 . Таким образом, предполагая наличие двухфазной области в заданном диапазоне параметров, можно рассматривать данную точка как псевдокритическую.

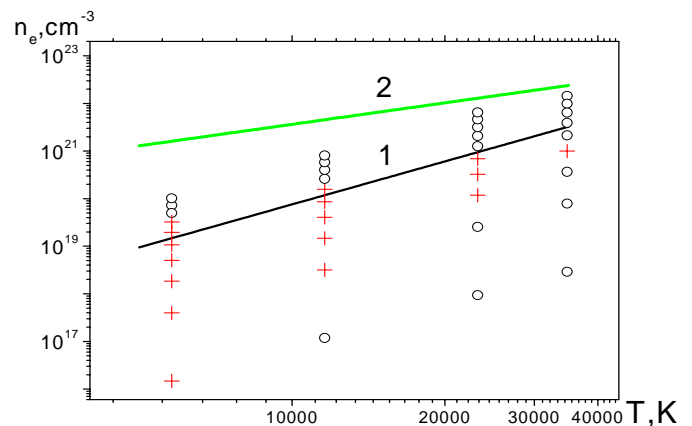


Рис. 3. Диаграмма характерных областей распределения флуктуаций давления. Крестиками обозначены области параметров, в которых функция распределения описывается суперпозицией двух нормальных распределений. Кружочками обозначены области нормального распределения давления. Линия 1 – $\Gamma=1$. Линия 2 соответствует параметру вырождения $\epsilon_F/kT = 1$, где ϵ_F – энергия Ферми

Граница между возбужденными атомами и парными флуктуациями, обусловленная штарковским уширением $\Delta E_{st} = 2Ry/[s^2(s+1)]$, на рис. 4(a) представлена линией 1. Линия 2 соответствует щели $\Delta E = 2\Gamma kT \sim n^{1/3}$. Обе линии не зависят от температуры. Таким образом, на рис. 4(a) представлены три области электронных состояний. Область I – область связанных состояний, характеризующихся дискретным спектром. II – область парных флуктуаций, характеризующихся квазинепрерывным спектром в следствие штарковского уширения уровней. III – область многочастичных флуктуаций и свободных состояний.

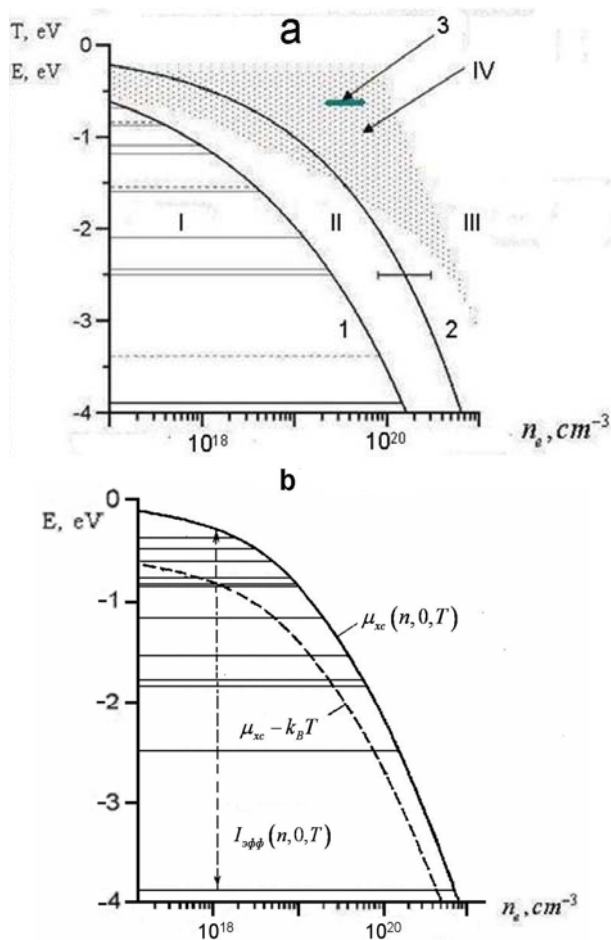


Рис. 4. (a) – Характерные области электронных состояний в неидеальной плазме. Диаграмма “энергия уровня – плотность частиц”: I – область дискретного спектра цезия (сплошные линии) и водорода (пунктирные линии), II – область парных флуктуаций, III – область свободных состояний и многочастичных флуктуаций. Горизонтальная линия, пересекающая линию 2, соответствует первому возбужденному состоянию атома цезия для области параметров исследуемых в [9]. IV – область параметров в которой функция распределения давления описывается суперпозицией двух нормальных распределений. (b) – Энергия парных связанных состояний и усредненный край непрерывного спектра, аппроксимированный обменно-корреляционной частью химического потенциала $\mu_{xc}(n_e, n_a, T)$, для цезиевой плазмы про $T = 6000$ K [10]

Область IV на рисунке 4(a) – область “аномально” поведения функции распределения флуктуаций

давления. Большая часть данной области находится в диапазоне параметров плазмы, в котором возможность образование электрон – ионных пар сильно подавлена. Если учесть, что описание функций распределения давления суммой двух распределений Гаусса есть косвенное указание на существование фазового перехода, то расположение области IV может служить подтверждением предположения, выдвинутого в [3,4], о главной роли электрон – ионных пар в поддержании термодинамической устойчивости в плазме.

В [10] представлен рисунок 6.18 (в данной работе 4(b).) схожий по целям и дизайну с рис. 4(a). На нем также как и на 4(a) показаны границы области существования связанных состояний в неидеальной плазме. Так как алгоритм, используемый для распознавания пар, исключал короткоживущие пары, время жизни которых порядка времени электрон – ионного столкновения [5], то кривая 2 на 4(a) соответствует пунктирной линии на 4b. При этом на рис. 4(a) в отличие от 4(b) представлена область существования парных флуктуаций, характеризующаяся квазинепрерывным спектром в силу штарковского уширения уровней, ограниченная линиями 1 и 2.

При построении рис. 4(b) использовалась зависящая от T модель, использующая приближения близкие к моделям Планка – Ларкина и Риве – Ромпе. Проводилось ограничение спектра связанных состояний обменно-корреляционной частью химического потенциала $\mu_{xc}(n_e, n_a, T)$, что соответствует сплошной линии на рисунке 4(b). При этом предполагалось, что состояния с энергией связи меньше kT следует рассматривать как квазисвободные, вследствие чего, данную величину следует вычестить из выражения для $\mu_{xc}(n_e, 0, T)$, что соответствует пунктирной линии на 4b.

Отметим, что результаты моделирования плотной плазмы классическим методом молекулярной динамики свидетельствуют о недостаточной точности использования данных моделей в неидеальной плазме [5] и отсутствие существенной зависимости границы области существования пар от T . Следует также отметить, что классическая молекулярно-динамическая модель указывает на то, что область между линией 2 на рис. 4(a) и областью положительных энергий заполнена многочастичными флуктуациями, возникающими в результате локализации электронов в флуктуациях ионной плотности [5]. То есть, в отличие от [10], в рамках применяемого нами подхода область парных состояний и область свободных электронов непосредственно не граничат, и нет понижения энергии ионизации атома.

Дополнительным фактом, свидетельствующим о возможности возникновения области термодинамической неустойчивости, является характерный вид зависимости давления от плотности в диапазоне $n_e \in [2 \times 10^{19}; 7.2 \times 10^{19}] \text{ cm}^{-3}$, представленный на рис. 5. Данный диапазон значений плотности обозначен на рисунке 4(a) линией 3.

Таким образом, данные значения концентраций зарядов находятся в области не гауссового поведения функции распределения флуктуаций давления, где парные связанные состояния отсутствуют.

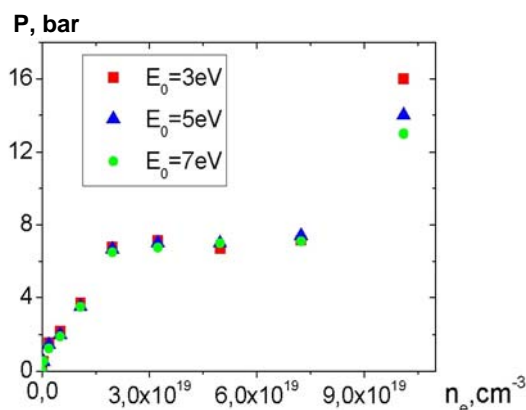


Рис. 5. Зависимость давления от плотности зарядов при $T = 5800 \text{ K}$

При этом следует заметить, что при $T \geq 11600 \text{ K}$ наблюдается монотонный рост давления с увеличением плотности, и области термодинамической неустойчивости не возникает.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При расчете флуктуаций давления была обнаружена область параметров плазмы (плотности зарядов и температур) в которой функция распределения флуктуаций давления имеет явно выраженную асимметричную форму и не может быть описана функцией распределения Гаусса. В данной области параметров плазмы нет связанных состояний и парных флуктуаций. Полученные функции распределения могут быть довольно точно описаны суперпозицией двух распределений Гаусса. При этом следует заметить, что распределение флуктуаций термодинамических параметров в равновесии должно описываться функцией распределения Гаусса. Данный факт может служить косвенным указанием на возможность фазового перехода.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- Z – статистическая сумма атома
- T – температура, К
- P – давление, Н/м²
- m – масса частицы, кг
- n_e – плотность зарядов, см⁻³
- n_a – концентрация электронейтральных частиц, см⁻³
- Γ – параметр неидеальности.
- s – главное квантовое число
- s_0 – главное квантовое число основного состояния
- k – постоянная Больцмана. ($1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К)
- Ry – постоянная Ридберга. ($13.6 \times 1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж)
- v – скорости частиц, м/с
- V – объем системы, м³

Индексы:

i, j – порядковый номер частицы

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Норман Г. Э., Старостин А.В. Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // ТВТ. Т. 6. № 3. 1968. С. 410 – 415.
2. Норман Г. Э., Старостин А.В. Термодинамика сильно-неидеальной плазмы. // ТВТ. Т. 8. №2. 1970. С. 413 -438.
3. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Термодинамические свойства ударно сжатой плазмы. Энциклопедия Низкотемпературной Плазмы (ред. Фортов В.Е.). Серия Б. Том III-1 "Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы" (ред. А.Н. Старостин, И.Л. Иосилевский), М.: Физматлит, с.124-139.
4. Каклюгин А.С., Норман Г.Э., Термодинамические функции невырожденной частично ионизованной плазмы для области параметров от газовой до сильно неидеальной. Псевдопотенциальный подход, Энциклопедия Низкотемпературной Плазмы (ред. Фортов В.Е.). Серия Б. Том III-1 "Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы" (ред. А.Н. Старостин, И.Л. Иосилевский), М.: Физматлит, с.247-276.
5. Lankin A. V., Norman G. E. Crossover from bound to free states in plasmas // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2009. – V. 42. – P. 214032
6. Morozov I. V., Norman G. E. Collisions and Langmuir Waves in Nonideal Plasmas//J. of Experim. and Theor. Phys., 2005. – V. 96. – N 2. – P. 370 – 384.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Физматлит, 1995. С. 279-292.
8. Зайцев Р.О., Введение в современную статистическую физику. М.: КомКнига, 2006. С. 38-45, 68-99.
9. Lomakin B.N., Fortov V.E. // J. Exp. Theor. Phys., 1973. – V. 36. – P. 48.
10. W.-D. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling, R. Röpke, *Quantum Statistic of Charge Particle System* (Akademie, Berlin, 1996).