

3. A.Fortini, A.-P.Hynninen, M.Dijkstra. Gas-liquid phase separation in oppositely charged colloids: stability and interfacial tension // Journal of Chemical Physics, 2006, vol. 125, 094502.
4. M.Dijkstra, R.van Roij. Vapour-liquid coexistence for purely repulsive point-Yukawa fluids // Journal of Physics: Condensed Matter, 1998, vol. 10, p. 1219–1228.
5. Б.А.Клумов, Г.Е.Морфилл, С.И.Попель. Формирование структур в запыленной ионосфере // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2005, т. 127, вып.1, с. 171–185.
6. И.Л.Иосилевский. Фазовые переходы в кулоновских моделях // Уравнения состояния в экстремальных условиях. Ред. Г.В.Гадияк, Новосибирск: Изд. СОАН СССР, 1981, с. 20–38.
7. Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A. Macroions non-linear screening in complex plasma // Journal of Physics: Conference Series, 2018, vol. 946, 012147.

## МИКРОПОЛЕ И СПЕКТРЫ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

*А.А. Белов<sup>1</sup>, Н.Н. Калиткин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия

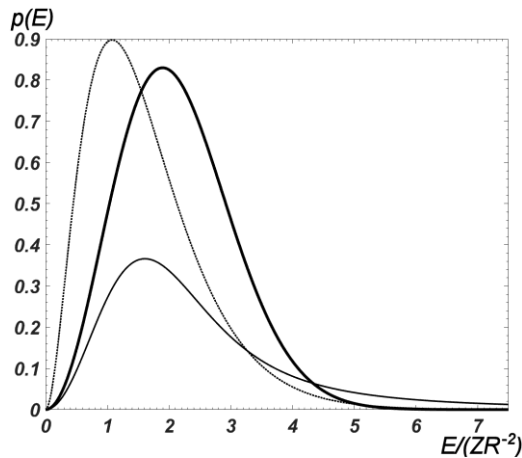
**1. Проблема.** Плазма состоит из заряженных частиц разных сортов:  $k$ -кратных ионных остовов с концентрациями  $x_k$  ( $k=0$  соответствует нейтральным частицам) и электронов с концентрацией  $x_e$ . Поскольку это средние, а не локальные величины, то для них отсутствуют флуктуации. Поэтому в силу электронейтральности плазмы выполняются законы сохранения числа частиц и заряда

$$\sum_k x_k = 1, \quad \sum_k kx_k = x_e. \quad (1)$$

Эти частицы находятся в хаотическом тепловом движении. Поэтому электрическое поле, создаваемое ими в некоторой точке пространства, будет флуктуировать во времени. Таким образом, различные ионные остовы находятся в неодинаковых мгновенных электрических полях.

Наличие такого поля существенно влияет на оптические свойства плазмы. Если ионный остов находится в электрическом поле, то его уровни смещены относительно уровней изолированного от внешних полей иона. Поэтому для каждого отдельного иона будут смещены пороги фотоэффекта с разных уровней и положения спектральных линий, соответствующих переходам между уровнями одного и того же атома. Поскольку электрическое поле флуктуирует, то для совокупности всех ионов это приводит к размытию порогов фотоэффекта и уширению спектральных линий.

Отсюда видно, что для правильного описания оптических свойств плазмы необходимо знать статистические свойства микрополя. Серьезное изучение началось с работы Хольцмарка [1]. В этой работе из приближенных соображений была построена функция распределения электрического поля  $p(E)$  в данной точке пространства. Она выражается через несобственный интеграл, и ее вид приведен на рис. 1, где для напряженности  $E$  выбран характерный масштаб  $\sim Z/R^2$ ; здесь  $Z$  – усредненный заряд всех сортов частиц,  $R$  – радиус сферизованной атомной ячейки. Это позволило разумно оценить штарковское уширение оптических линий [2], [3].



**Рисунок 1.** Функции распределения микрополя; тонкая линия – по Хольцмарку, пунктир – модель SHO, жирная линия – модель QUIP

Однако никто не обращал внимания на один принципиальный недостаток этой модели. Распределение Хольцмарка имело медленно убывающий «хвост»  $p(E) \sim E^{-5/2}$  при  $E \rightarrow \infty$ . Это приводило к тому, что плотность энергии электрического поля

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

оказывалась бесконечной. Это показывает, что распределением Хольцмарка можно пользоваться только в районе максимума, но не в районе «хвоста». Тем самым, оно позволяет разумно описывать полуширину спектральной линии, но не ее крылья.

Распределение Хольцмарка выводилось в предположении идеальности плазмы. Это справедливо для разреженной плазмы лабораторных разрядов или звездных атмосфер. С 1960-х годов началось интенсивное изучение плазмы высокой плотности, возникающей при лазерном испарении вещества. В 1980-е годы группа Иглесиаса (Лос-Аламос) построила модели  $p(E)$ , ориентированные на плазму высоких плотностей (см., например, [4]). В них модельно учитывалось взаимодействие заряженных частиц. При высоких плотностях распределения сильно отличались от хольцмарковского. Однако в них сохранялся тот же принципиальный недостаток -- медленно убывающие «хвосты».

Для сверхвысоких плотностей в Лос-Аламосе еще ранее была разработана модель SHO (Simple Harmonic Oscillators) [5]. В ней «хвосты» распределения были быстро затухающими (см. рис. 1), 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.

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

Таким образом, для полноценного описания микрополя потребовались новые подходы, начатые в [7], [8] в предположении пространственной однородности микрополя. Ниже изложено, как следует обобщить эти подходы на случай неоднородного микрополя.

**2. Пространственная неоднородность.** Точку, в которой ищем поле, выберем за начало координат. Пусть плазма состоит из частиц с зарядом  $Z_j$  с мгновенными положениями  $\vec{r}_j$ . Этими частицами являются ионы и электроны ( $Z_e = -1$ ). Плазма электронейтральна, так что

$$\sum Z_j = 0. \quad (3)$$

Нам нужны характеристики поля в точке  $\vec{r}$  вблизи начала координат. Каждый заряд создает в этой

точке потенциал  $\varphi_j = Z_j / |\vec{r}_j - \vec{r}|$ . Поэтому полный потенциал равен

$$\varphi(\vec{r}) = \sum Z_j / |\vec{r}_j - \vec{r}|. \quad (4)$$

Разложим этот потенциал по  $\vec{r}$ , ограничиваясь для простоты записи квадратичными членами:

$$\varphi(\vec{r}) \approx \varphi(0) + (\vec{r}, \vec{E}) + (\vec{r}, \vec{U} \vec{r}). \quad (5)$$

Здесь скаляр, вектор электрического поля  $\vec{E}$  и тензор  $U$  имеют следующий вид:

$$\varphi(0) = \sum Z_j / r_j, \quad \vec{E} = \sum Z_j / r_j^3 \{x_j, y_j, z_j\}, \quad U = \sum Z_j / r_j^5 u, \quad r_j = \sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}. \quad (6)$$

$$u = \begin{pmatrix} 3x_j^2 - r_j^2 & 3x_j y_j & 3x_j z_j \\ 3x_j y_j & 3y_j^2 - r_j^2 & 3y_j z_j \\ 3x_j z_j & 3y_j z_j & 3z_j^2 - r_j^2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Во всех предшествующих работах рассматривалась только напряженность  $\vec{E}$ , а наличие не только третьего, но и первого слагаемых в (4) не учитывалось.

### 3. Распределения

**Средний заряд.** Обозначим через  $V$  средний объем, приходящийся на один ион. Тогда радиус  $R$  сферы объема  $V$  есть половина среднего расстояния между ионами. Введем среднее значение заряда  $Z$ , учитывающее наличие ионов и электронов. В классической работе Хольцмарка было получен следующий способ усреднения зарядов:

$$Z_H = \left( \sum |Z_j|^{3/2} x_j \right)^{2/3}. \quad (8)$$

Этим выражением пользовались в течение ста лет. Однако прямым расчетом среднего потенциала системы точечных зарядов нам удалось показать, что правильным является усреднение

$$Z_D = \left( \sum |Z_j|^2 x_j \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Оно совпадает с определением дебаевского заряда, получающегося из энергетических соображений. В многократно ионизованной плазме одного элемента оба способа усреднения дают довольно близкие значения заряда. Однако если плазма частично ионизована или содержит смесь элементов с сильно отличающимися порядковыми номерами, то расхождение между этими двумя формулами становится значительным.

Таблицы дебаевского заряда приведены в базе данных ТЕФИС [9] для плазмы одного элемента с  $Z \leq 103$  в диапазоне температур 0.25 эВ – 40 кэВ и плотностей  $10^{-6}$  г/см<sup>3</sup> –  $10^{+6}$  г/см<sup>3</sup>.

**Функции распределения.** Согласно [7], [8], примем гипотезу квазинезависимости частиц (модель QUIP). Это предполагает, что кинетическая энергия движения существенно больше энергии кулоновского взаимодействия. Тогда для нахождения функции распределения величин (6) – (7) можно использовать закон больших чисел. Это приводит к следующим закономерностям. Скалярный потенциал  $\varphi(0)$  имеет гауссову функцию распределения

$$p(\varphi) = \left( \sqrt{\pi} \varphi_0 \right)^{-1} \exp\left(-\varphi^2 / \varphi_0^2\right). \quad (10)$$

Каждая из компонент вектора напряженности также имеет гауссово распределение, а длина этого вектора имеет максвелловское распределение:

$$p(E_i) = \left( \sqrt{\pi} E_0 \right)^{-1} \exp\left(-E_i^2 / E_0^2\right), \quad p(E) = \left( 2\sqrt{\pi} E_0^3 \right)^{-1} E^2 \exp\left(-E^2 / E_0^2\right). \quad (11)$$

При этом компоненты  $E_x$ ,  $E_y$ ,  $E_z$  не коррелированы ни между собой, ни со скаляром  $\varphi(0)$ . Компоненты квадрупольного тензора также распределены по Гауссу и не коррелированы с компонентами вектора  $\vec{E}$

$$p(U_{ik}) = \left( \sqrt{\pi} U_0 \right)^{-1} \exp\left(-U_{ik}^2 / U_0^2\right). \quad (12)$$

Однако между собой компоненты тензора  $U$  коррелированы. Во-первых, очевидно, что тензор симметричен  $U_{ij} = U_{ji}$ . Во-вторых, можно показать, что след тензора равен нулю  $\text{Tr}U = 0$ . Таким образом, девятикомпонентный тензор имеет 5 независимых компонент.

В разложении (5) можно выписать и кубический член. Он будет содержать тензор третьего ранга с 27 компонентами. Можно показать, что из них независимыми будут только 10 компонент. Мы не приводим его ввиду громоздкости.

**Масштабные константы** определяются из следующих соображений. Электрическое поле имеет плотность энергии (2). Умножая плотность  $W$  на  $V$ , получаем энергию в средней атомной ячейке. Квазинезависимость частиц означает среднюю равномерность их распределения в пространстве. В этом случае энергия кулоновского взаимодействия на одну ячейку равна  $-0.9 Z^2/R$ . Но прямое взаимодействие частиц можно трактовать как взаимодействие одной частицы с полем, созданным полем другой частицы, но с обратным знаком. Это дает

$$E_0 = \sqrt{18/5} Z/R^2. \quad (13)$$

Максимум распределения напряженности достигается при  $E = E_0 \approx 1.90 Z/R^2$ . Это достаточно близко к максимуму распределения Хольцмарка, который достигается при  $E \approx 1.65 Z/R^2$ . Поскольку напряженность есть градиент потенциала, а квадрупольный тензор есть производная напряженности, то

$$\varphi_0 = \sqrt{18/5} Z^2/R, \quad U_0 = 6\sqrt{2/5} Z^2/R^3. \quad (14)$$

Отсюда видно, что разложение (5) есть ряд по степеням  $R^{-1}$ .

**4. Оптические свойства** плазмы определяются взаимодействием света со свободными и связанными электронами. Взаимодействие со свободными электронами образует непрерывную часть спектра поглощения, то есть плавно распределенный по частотам фон. Взаимодействие со связанными электронами обусловлено двумя эффектами. Первый – поглощение в линиях, когда электрон переходит с одного уровня атома на другой уровень того же атома. В спектре это проявляется как узкая линия. Интенсивность линии пропорциональна заселенности уровня, с которого происходит переход. Второй – фотоэффект, когда электрон переходит со связанного состояния в непрерывный спектр. При этом в спектре появляется резкий всплеск по частоте, равной энергии связанного состояния, и плавное спадание в сторону больших частот. Здесь интенсивность также пропорциональна заселенности состояния.

Учет микрополя существенно корректирует описанную картину. Во-первых, даже в разреженной плазме микрополя существенно уменьшают заселенность высоких уровней. При увеличении плотности плазмы этот эффект распространяется и на низкие состояния. Во-вторых, положение уровня при наличии поля смещается, а флуктуация поля приводит к переменному смещению. В результате пороги фотоэффекта становятся не резкими, а размытыми, а ширины спектральных линий увеличиваются.

**Уменьшение заселенностей.** Флуктуация скалярного члена в (5) сдвигает всю систему уровней вверх или вниз. При сдвиге вниз ионизации не происходит, но при сдвиге вверх ионизируются все электроны с возбужденных уровней, оказавшихся выше фона. Видно, что этот фактор уменьшает заселенность уровней, но не более, чем в 2 раза.

Линейный член в (5) эквивалентен однородному внешнему полю. Сумма этого поля с потенциалом внутриатомного поля имеет седловую точку, лежащую ниже нулевого фона. Уровни, лежащие выше седловой точки, ионизируются. Этот эффект оказывается преобладающим при высоких плотностях. Вклад квадратичного и кубического членов оказывается обычно заметно меньше линейного.

**Экспериментальная проверка.** С 1984 года в Лаборатории физики плазмы, Университет Рочестера проводятся уникальные эксперименты по спектрам лазерной плазмы в сотрудничестве с ядерными центрами США (см., например, [10]). В этих экспериментах оболочка диаметром 0.1 – 1.0 мм наполнялась смесью газов, содержащих Ar и Kr. Такая мишень нагревалась мощной

многопучковой лазерной системой. Образовывалась плазма, в которой достигались  $T \sim 1-3$  кэВ и  $\rho_0 \sim 1$  г/см<sup>3</sup>. В таких условиях вещество почти полностью ионизовано, и плазма содержит лишь небольшое количество водородо- и гелиеподобных ионов Ar, а также ионы Kr с L-оболочкой. Наблюдаются рентгеновские спектры этих ионов в диапазоне 2.9 - 4.2 кэВ. Они содержат небольшое количество линий, ширины которых достигают  $\sim 50$  эВ. Эти эксперименты особенно интересны, поскольку в них представлен спектр большой ширины, содержащий сразу все наблюдаемые линии одной серии.

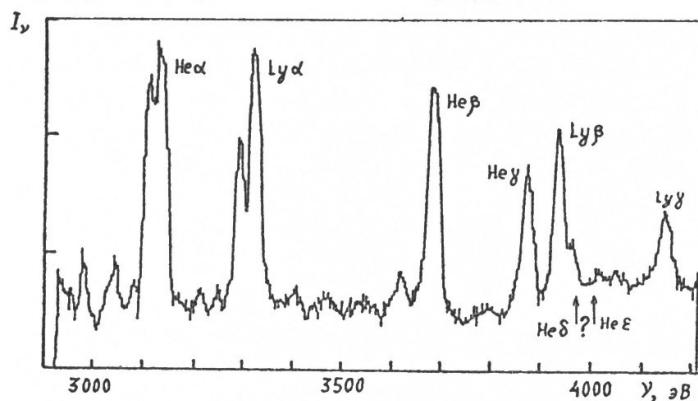


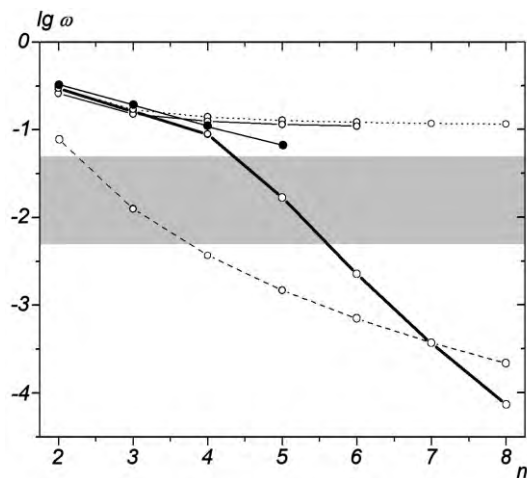
Рисунок 2. Рентгеновский спектр лазерной плазмы в эксперименте [10]

Для апробации модели нужно объяснить сразу полную серию линий, включая следующие характеристики: количество наблюдаемых линий, отношение интенсивностей всех линий серии (силы осцилляторов), качественную форму линий (отсутствие у них «крыльев») и их ширины. Этого нет в оригинальных экспериментальных работах. Наши оценки показали, что эффект Доплера приводит к уширению линий на  $\sim 1$  эВ, чем можно пренебречь. Расчеты по предложенной теории микрополя показали следующее.

Во-первых, число наблюдаемых линий объясняется хорошо: в эксперименте слабо видна четвертая линия и почти незаметна пятая, а по расчету должно наблюдаться на одну линию больше. Такая разница очень невелика по сравнению с расчетами по другим моделям. При этом основной вклад в исчезновение линий здесь вносит линейная компонента микрополя, а вклады скалярного и квадрупольного членов малы.

Во-вторых, форма линий определяется сверткой тонкой дельта-образной первичной линии с функцией распределения микрополя. Линейная компонента микрополя имеет максвелловское распределение, которое резко обрывается как при малых, так и при больших напряженностях. Это приводит к отсутствию крыльев линии, что качественно согласуется с экспериментом.

Ширины и относительные интенсивности линий лишь по порядку величины согласовались с нашими расчетами. Однако нам неизвестны истинные плотности вещества мишени, и мы использовали оценки экспериментаторов. Эти величины сильно влияют на ответ. Поэтому для более надежного сопоставления необходимо подробные данные об экспериментах, которые в литературе отсутствуют.



Темные маркеры – эксперимент, светлые – различные модели (указаны в тексте)

**Рисунок 3.** Заселенности уровней  $\text{Ar}^{+16}$  с главным квантовым числом  $n$  в эксперименте [10].

На рис. 3 показаны расчеты заселенности по разным моделям. Темными маркерами показаны экспериментальные оценки заселенности по линиям рис. 2. Жирной линией показана модель QUIP. Видно, что ее теоретические заселенности удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Штриховой линией показана часто используемая модель Планка-Ларкина [11]. Она сильно занижает заселенности. Согласно ей, наблюдались бы интенсивная первая и слабая вторая линии. Тонкой сплошной линией показаны модели дебаевского типа, рассчитывающие количество уровней в дебаевском потенциале. Эти модели сильно завышают количество наблюдаемых линий: они предсказывают не менее 8 наблюдаемых линий, причем их интенсивности должны быть примерно одинаковы. Это резко противоречит эксперименту. То же относится к модели, в которой состояния обрезаются, если квазиклассическая точка поворота волновой функции выходит за пределы радиуса ячейки  $R$  (пунктирная линия).

Таким образом, все ранее представленные в литературе модели неправильно описывают количество и интенсивность наблюдаемых линий, и только модель QUIP разумно их передает. Аналогичная картина получается для экспериментов в совершенно других условиях: водородная плазма в капиллярном разряде при  $T \sim 20$  кК.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-11-10001

### Список литературы

1. Holtzmark J. // Ann. Phys. 1919. Vol. 58. P. 577.
2. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров – М.: Изд-во физ. -мат. литературы, 1963.
3. Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме. – М.: Мир, 1978.
4. Iglesias C.A., DeWitt H.E., Lebowitz J.T. et al. // Phys. Rev. A. 1985. Vol. 31. P. 1698.
5. Broyles A.A. // Phys.Rev. 1955. Vol. 100, P. 1181.
6. Голосной И.О., Денисов О.Б., Орлов Н.Ю. // Матем. моделирование. 1994. Т. 6, № 9, 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., Белов А.А. База данных ТЕФИС. Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва.
10. Hooper F., Jr., Mancini R.C., Kilcrease D.P., et. al. // SPIE. High intensity laser-matter interactions. 1988, V.913, P.129.
11. Ларкин А.И. // ЖЭТФ, 1960, Т. 38, № 6, С.1896.