

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ЭНЕРГИЯМ ЭЛЕКТРОНА В НЕИДЕАЛЬНОЙ АТОМАРНОЙ ПЛАЗМЕ: ТЕОРИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА.

Хомкин А.Л., Шумихин А.С.

Объединенный институт высоких температур РАН

В последнее время появились данные о численном моделировании модельных кулоновских систем («кулон с полочкой»), в которых прямым измерением определялось распределение электронов по энергиям во всем диапазоне энергий: от отрицательных до положительных значений. Эти данные (Норман Г.Э., Ларкин А. В. – 2 режима, и Бобров А., Зеленер Б.В. – 2 режима) позволяют проверить ряд принципиальных вопросов теории неидеальной атомарной плазмы.

Как хорошо известно, электроны в атомарной плазме занимают состояния с большой отрицательной и положительной энергиями. В реальной плазме глубокие состояния являются квантовыми и связанными, что и обеспечивает сходимость рассчитываемых величин. В свое время для описания заряженной компоненты частично ионизованной плазмы и неидеальной полностью ионизованной плазмы была предложена кулоновская модель «с полочкой». Первоначально предполагалось, что связанные состояния, лежащие ниже дна полочки, учитываются как идеально-газовая добавка, а для описания эффектов неидеальности в ионизованной компоненте можно воспользоваться этой моделью. Возможное образование связанных состояний непосредственно в самой модели первоначально не принималось во внимание.

Полученные в результате молекулярно-динамического моделирования функции распределения по энергиям (ФРЭ) однозначно показывают, что связанные состояния в модели есть и число их значительно.

Для теоретического осмысления полученных результатов нами рассчитана плотность состояний и функция распределения по энергиям в приближении ближайшего соседа для кулоновской модели «с полочкой». Расчет выполнен в каноническом ансамбле: заданы полное число ионов (электронов) и температура. Необходимость обрезания дальнего действия (та или иная) и ее связь с концентрацией свободных зарядов вносят свою специфику в расчет. В результате полученная теоретически ФРЭ сравнивается с данными численного моделирования. Выполненные сравнения с теоретическим расчетом позволяют сделать выводы о равновесности полученных распределений, проанализировать их особенности.

На основе полученной численно ФРЭ, нормированной на единицу, получена степень ионизации в модели, которая сравнивается с таковой, полученной из формулы Саха. Хотя точность полученных распределений невысока, мы попытались на их основе получить значения снижения потенциала ионизации, которое сравнивается с многочисленными рекомендациями, существующими в литературе.

Полученная прямыми методами ФРЭ для электронов служит дополнительным аргументом в пользу сформулированного авторами утверждения, что в неидеальной, казалось бы полностью ионизованной плазме, всегда присутствует заметная доля связанных состояний, лежащих вблизи порога ионизации. Связанные состояния исчезают только при перекрытии классически доступных областей движения электронов в основном состоянии, да и то не полностью.