

**Хихлуха Данила Романович**

**КИНЕТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В УЛЬТРАХОЛОДНОМ  
РИДБЕРГОВСКОМ ВЕЩЕСТВЕ**

01.04.07 — физика конденсированного состояния вещества

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Автор:



**Москва 2011**

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете  
"МИФИ"

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор  
**Манькин Эдуард Анатольевич**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор  
**Ошурко Вадим Борисович**  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
**Валеев Валерий Галимзянович**

Ведущая организация: **Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН**

Защита состоится «8» февраля 2012 г. в 15<sup>00</sup> на заседании диссертационного совета Д212.130.06 при НИЯУ МИФИ по адресу: 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел. (499) 323 9526, в конференц-зале К-608 (корпус «К»)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Автореферат разослан «\_\_»\_\_\_\_\_ 2011 г. Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном экземпляре, заверенный печатью организации.

Учёный секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук,  
профессор



Яковлев В.П.

# Общая характеристика работы

## Актуальность работы

Изучение газовых сред при экстремально низкой температуре вызывает большой интерес уже достаточно длительное время. Исследования в этой области начались в 1925 году с теоретического предсказания Бозэ–Эйнштейновской конденсации и продолжаются до сих пор. Качественное изменение свойств газовой системы при ультранизких температурах обуславливается возникновением сильного взаимодействия между частицами.

Кроме того, учет взаимодействия приводит к вопросу о возможности образования кластеров в газе. Эта проблема по-прежнему остается актуальной и касается атомов и молекул как в основном, так и в возбужденном (ридберговском) состояниях.

Возможность фазового перехода в системе возбужденных атомов была показана в работах Э.А. Манькина еще в 80-х годах прошлого столетия [1, 2]. В этих ранних работах рассматривался газ электронов и ионов в области сильного вырождения и при температуре близкой к нулю. Конденсированные возбужденные состояния получили название ридберговского вещества. В результате теоретических исследований подобной системы ультрахолодных возбужденных состояний были предсказаны новые физические явления, связанные с образованием структуры.

Экспериментальные исследования в этой области, как и в случае Бозэ–Эйнштейновской конденсации, были затруднены отсутствием практических способов охлаждения газа до температуры порядка нанокельвинов. Достижение таких сверхнизких температур стало возможным после открытия принципа лазерного охлаждения атомов [3]. Вкратце этот принцип состоит в том, что частота переизлученного атомом фотона оказывается в среднем сдвинута в фиолетовую область по сравнению с частотой падающего лазерного пучка. В результате переизлученный свет уносит больше энергии, чем поглощают атомы, что приводит к их охлаждению. Фиолетовое смещение вызывается доплеров-

ским сдвигом или высокочастотным штарковским сдвигом.

В 1999 году и позднее были опубликованы экспериментальные работы, в которых изучалась невырожденная частично ионизованная система ридберговских атомов при ультранизкой температуре, полученной с помощью лазерного охлаждения [4–6]. При этом энергия кулоновского взаимодействия частиц становится сравнимой со средней кинетической энергией частиц, что позволяет считать такую систему сильно неидеальной. Параметр кулоновской неидеальности, характеризующий это соотношение энергий, определяется выражением:

$$\gamma_e = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{k_b T_e}$$

где  $e$ ,  $n_e$  и  $T_e$  — заряд, плотность и температура электронов соответственно, а  $k_b$  — постоянная Больцмана. При начальных температурах  $T_e^0 = 1 - 30$  К и плотностях  $n_e^0 = 10^9 - 10^{10}$  см<sup>-3</sup> параметр неидеальности может достигать 23. Такие значения  $\gamma_e$ , как было показано Э.А. Манькиным с коллегами, могут привести к образованию структуры, замедлению рекомбинации и возникновению особенностей во взаимодействии ридберговских атомов [7].

Настоящая диссертация посвящена теоретическому исследованию кинетических процессов в ультрахолодном ридберговском веществе, состоящем из ридберговских атомов различной степени возбуждения, а также свободных электронов и ионов.

## Цели диссертационной работы

Вопросы, связанные с образованием и временем жизни конденсированных возбужденных состояний (или ридберговского вещества), требуют детального анализа кинетики процессов, протекающих в системе возбужденных частично ионизованных атомов при экстремально низких температурах, исследований функции распределения частиц по энергии и процессов рекомбинации в случае, когда кулоновское взаимодействие частиц превосходит их кинетическую энергию. В связи с этим сформулированы основные цели диссертационной ра-

боты:

- Исследование кинетики заселения связанных электронных состояний в ультрахолодной системе ридберговских частиц
- Исследование функции распределения электронов по энергиям в подобной системе
- Исследование процесса трехчастичной рекомбинации в ультрахолодной системе ридберговских частиц и определение влияния параметра кулоновской неидеальности на скорость рекомбинации

### **Научная новизна результатов**

1. Впервые получено распределение населенности электронных состояний в широком диапазоне в неравновесной ультрахолодной системе ридберговских частиц
2. Предложены новые вероятности переходов между  $S$  состояниями ридберговского атома при его взаимодействии с медленным свободным электроном
3. Впервые получена температурная зависимость коэффициента трехчастичной рекомбинации на основе данных об изменении населенности электронных состояний. Полученные результаты подтверждают предположение о замедлении рекомбинации с ростом параметра кулоновской неидеальности
4. Предложен новый метод определения температуры и плотности свободных электронов в системе ультрахолодных частично ионизованных ридберговских атомов на основании данных о населенности возбужденных состояний

## Положения, выносимые на защиту

1. Получена функция распределения чисел заполнения ридберговских состояний электрона с помощью решения системы кинетических уравнений баланса
2. Получены новые вероятности переходов между связанными  $S$  состояниями ридберговского атома при взаимодействии с медленным свободным электроном
3. Установлено, что температурная зависимость коэффициента трехчастичной рекомбинации имеет отклонение от закона Гуревича – Питаевского в сторону уменьшения в области низких температур
4. Разработан метод определения температуры и плотности свободных электронов в ультрахолодной неравновесной неидеальной системе ридберговских частиц по экспериментально измеренным населенностям связанных ридберговских состояний

**Апробация работы** Основные результаты диссертации докладывались на: Научных Сессиях НИЯУ МИФИ 2010 и 2011, 7ой и 8ой Научных Школах РНЦ «Курчатовский Институт» 2009 и 2010, XXXVII и XXXVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС 2010 и 2011, XXV and XXVI International Conference on Equations of State for Matter 2010 and 2011, Научно-координационных сессиях РАН «Исследование неидеальной плазмы» 2009 и 2010, Семинарах Теоретического отдела им. Бибермана ОИВТ РАН, Семинаре академика Ю.М. Кагана (РНЦ «Курчатовский институт»), конкурсе молодежных научных работ по оптике и лазерной физике им. Басова (ФИАН).

**Публикации** По теме диссертации опубликовано 11 печатных работ, в том числе 3 в журналах, включенных ВАК РФ в перечень ведущих рецензируемых научных журналов.

**Структура и объем диссертации** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 60 наименований. Общий объем работы составляет 116 страниц и включает в себя 26 иллюстраций и 1 таблицу.

## Основное содержание работы

Во **введении** приведено обоснование актуальности работы и сформулированы цели диссертационной работы.

**Первая глава** посвящена обзору и анализу литературы. Рассматриваются ранние работы, в которых вводится понятие ридберговского вещества и рассматривается возможность фазового перехода в системе возбужденных атомов при абсолютном нуле температуры. Обсуждаются экспериментальные работы, связанные с получением ультрахолодных ридберговских атомов, а также методы диагностики температуры и плотности частиц. Рассматриваются теоретические работы по описанию эволюции ультрахолодной системы возбужденных частиц и кинетических процессов, протекающих в ней. Отдельно рассматривается группа работ [8–10], в которой для определения населенности связанных электронных состояний вблизи границы непрерывного спектра использовался классический метод молекулярной динамики. В рамках этого метода решались уравнения движения свободных электронов и ионов. Движение частиц предполагалось классическим в силу того, что тепловая длина волны много меньше среднего расстояния, т.е. при температурах  $T_e^0 = 1 - 30$  К и плотностях  $n_e^0 = 10^9 - 10^{10}$  см<sup>-3</sup> в системе отсутствует вырождение. Однако при расчете населенности состояний в области энергий  $E/k_b T_e \leq -4$  методом молекулярной динамики не удастся получить достаточную точность из-за небольшого числа частиц в ячейке с периодическими граничными условиями, и следовательно, малого числа событий, когда электрон находится на расстояниях значительно меньших среднего, а при увеличении параметра кулоновской неидеальности системы ридберговских частиц этот недостаток становится более существенным.

Простое увеличение числа частиц в ячейке приводит к улучшению качества получаемой статистики, но приводит к существенному замедлению счета. При росте  $N$  время расчета увеличивается как  $N^2$ .

Во **второй главе** представлены результаты расчета кинетики заселения ридберговских состояний в ультрахолодной системе ридберговских частиц. Оценки показывают, что после того как образовались возбужденные состояния вблизи границы с непрерывным спектром, заселение более низких происходит преимущественно за счет электронных ударов. Более того, при рассмотрении ударных переходов можно ограничиться состояниями изолированного атома водорода и пренебречь влиянием окружения. Действительно, в условиях экспериментов [4–6] среднее расстояние между частицами оценивается как  $r_m \sim \sqrt[3]{n_e} \sim 10^{-3}$  см, а радиус орбиты, на которой валентный электрон имеет энергию порядка  $k_b T_e$ ,  $r_a \sim 10^{-4}$  см. Это обстоятельство позволяет считать атомы невзаимодействующими друг с другом и рассматривать процесс неупругого рассеяния электрона на одиночном атоме.

Для исследования динамики заселения связанных состояний в диссертации предлагается модель идеального газа высоковозбужденных атомов без вырождения. В системе предполагается наличие свободных электронов с концентрацией  $n_e$  и температурой  $T_e$ . При неупругом соударении свободного электрона с атомом, с определенными вероятностями происходят следующие процессы:

- переход связанного электрона в более низкое состояние (тушение)
- переход связанного электрона в более высокое состояние (возбуждение)
- переход связанного электрона в непрерывный спектр (ионизация уровня)
- переход свободного электрона в связанное состояние (рекомбинация на уровень)

Предложенную модель удобно описывать с помощью системы кинетических уравнений баланса. Рассматривалось  $k$  уравнений для состояний с соответствующими главными квантовыми числами, начиная с заданного  $k$  и до основного



состояния. Кроме того, в систему уравнений баланса были включены уравнения для изменения температуры и концентрации свободных электронов.

$$\frac{dn_k}{dt} = \sum_{k \neq m} (n_m \omega_{mk} - n_k \omega_{km} - n_k \omega_{ke} + n_e^2 \omega_{ek}) \quad (1)$$

$$\frac{dn_e}{dt} = \sum_k (n_k \omega_{ke} - n_e^2 \omega_{ek}) \quad (2)$$

$$\frac{dT_e}{dt} = Q_{el} + Q_{in} \quad (3)$$

где  $\omega_{mk}$ ,  $\omega_{km}$ ,  $\omega_{ke}$ ,  $\omega_{ek}$  — вероятности ударных переходов с уровня на уровень и вероятности ударных переходов в непрерывный спектр и обратно;  $Q_{el}$ ,  $Q_{in}$  — скорости потерь энергии свободных электронов соответственно на упругие и неупругие соударения.

Если с помощью классического метода молекулярной динамики удастся описать захват свободных электронов на высокие энергетические уровни атомов и достаточно точно рассчитать населенность связанных состояний вблизи границы с непрерывным спектром, то для описания дальнейшего движения электронов вниз по связанным состояниям и расчета полной функции распределения с помощью системы кинетических уравнений баланса необходимо знать концентрацию свободных электронов. Однако метод молекулярной динамики не позволяет непосредственно определить этот параметр в произвольный момент времени. Тем не менее, зная населенность ридберговских состояний вблизи границы с непрерывным спектром, можно косвенно рассчитать  $n_e$  и таким образом корректно перейти от метода молекулярной динамики к решению системы кинетических уравнений баланса.

В диссертации показано, что в области спектра, где наблюдается максимальное сопротивление рекомбинационному потоку (так называемое “узкое место” спектра) населенность возбужденных состояний может быть описана равновесной функцией распределения для атома водорода (рис. 1) при данной температуре. Этот факт позволяет определить по формуле Саха эффективную плот-

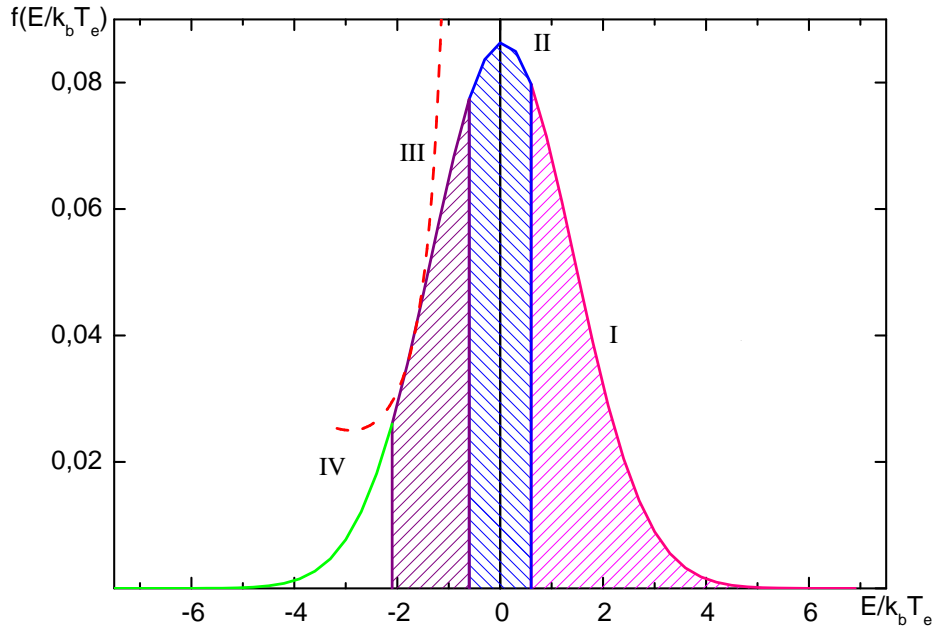


Рис. 1. Зоны функции распределения ( $\gamma_e = 0.5$ ,  $T_e = 7.19$  К,  $\tilde{n}_e = 2.4 \cdot 10^9$  см $^{-3}$ ): I — свободные электроны; II — квазисвязанные электроны (область многочастичных состояний); III — связанные электроны в ридберговских состояниях; IV — рекомбинационный хвост. Штриховая линия — классическая функция распределения для атома водорода  $f(E) \sim \frac{1}{E^{5/2}}$

ность свободных электронов, обеспечивающих это равновесие:

$$\tilde{n}_e = \sqrt{\frac{n_k(E_k/k_b T_e)}{\lambda_e^3 k^2} \exp\left(\frac{E_k}{k_b T_e}\right)} \quad (4)$$

где  $k$  — главное квантовое число уровня  $E_k$ , с которого условно начинается дискретный спектр, а  $\lambda_e$  — тепловая длина волны д'Бройля. Зная  $\tilde{n}_e$  и  $T_e$ , можно провести расчет населенности связанных состояний с помощью системы кинетических уравнений баланса. Причем в качестве максимального значения  $k$  необходимо выбрать значение из той области энергий, где функция распределения электронов совпадает с равновесной (рис. 1). Проведенный анализ показывает, что при правильном выборе границы дискретного спектра  $k$  наблюдается хорошее совпадение результатов решения системы кинетических уравнений баланса и расчетов методом молекулярной динамики в равновесной области функции распределения. Совместное использование этих двух методов позволяет определить полную функцию распределения для всех состояний электрона.

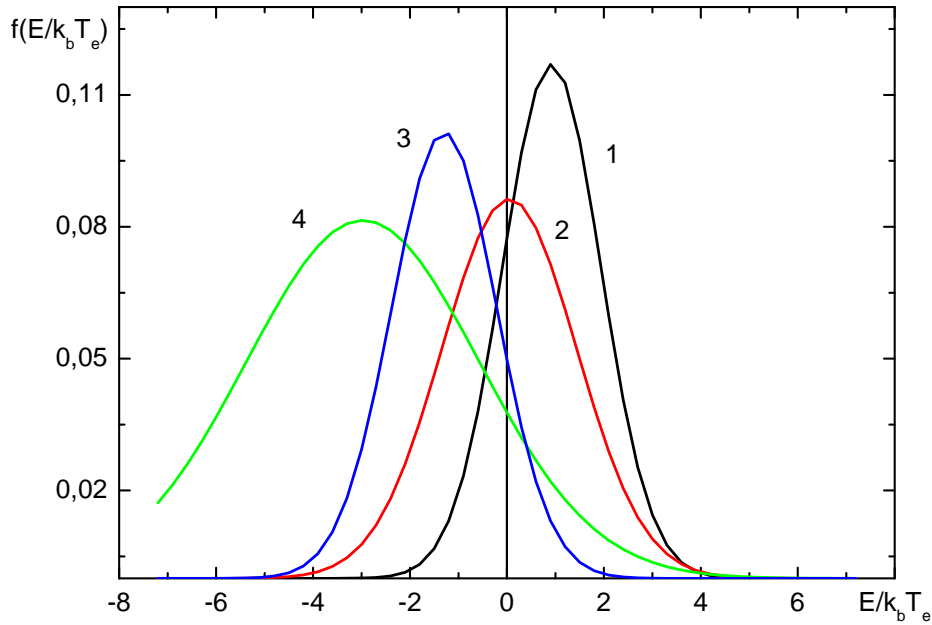


Рис. 2. Функции распределения электронов по полной энергии для различных температур  $T_e = 36$  К (1), 7 К (2), 5 К (3), 2 К (4) при  $n_e^0 = 10^{10}$  см $^{-3}$  (результаты интерполяции)

На рис. 2 приведены рассчитанные подобным образом полные функции распределения электронов по энергии  $f(E/k_b T_e)$  для различных температур. Приведенные кривые имеют тенденцию смещаться в сторону отрицательных энергий при уменьшении  $T_e$  (что эквивалентно увеличению  $\gamma_e$  при фиксированном  $n_e$ ). Видно, что с ростом параметра кулоновской неидеальности число состояний с энергией  $E/k_b T_e \ll 1$  (рекомбинационный хвост функции распределения) увеличивается. Для этой области спектра при температурах  $T_e = 1 - 30$  К энергия налетающего электрона  $E$  становится сравнима или меньше энергии перехода между ближайшими связанными состояниями  $E_{if}$ . В этом случае налетающий электрон считается медленным.

Проведенный анализ показывает, что классическое [11] и квазиклассическое [12] приближения для определения вероятностей перехода при неупругом рассеянии электрона на атоме применимы, если  $E \gg E_{if}$ . Более того, при уменьшении энергии налетающего электрона (понижении температуры электронного газа) вероятности перехода, рассчитанные в этих приближениях, начинают увеличиваться, что физически некорректно. В диссертации предлагаются новые полуэмпирические выражения для этих вероятностей в случае, когда

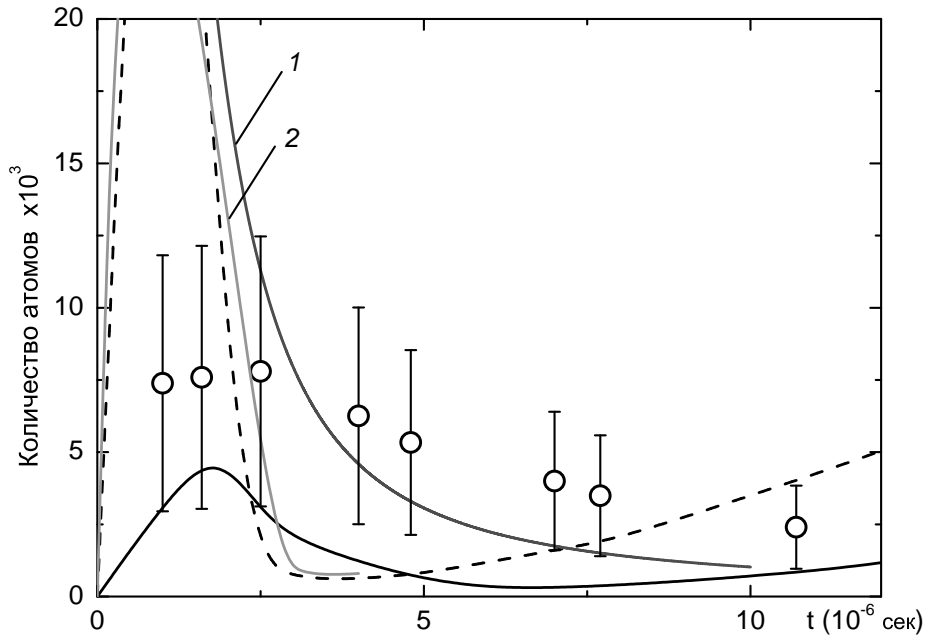


Рис. 3. Зависимость суммарной населенности уровней  $40 < p < 100$  от времени. Кружками отмечены экспериментальные данные [6]. Начальная температура свободных электронов 6 К, начальная концентрация  $2.6 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ . Черная сплошная и пунктирная линии — результаты расчетов [14, 15]. Линия 2 соответствует данным работы [13]. Линия 1 — решение системы уравнений баланса с использованием предложенных вероятностей перехода

$$E \lesssim E_{if}.$$

Отличие значений вероятностей перехода, рассчитанных при этом условии, от результатов, полученных в классическом приближении, позволяет говорить о том, что процесс рекомбинации при  $T_e < 300 \text{ К}$  замедляется по отношению к имевшимся ранее представлениям [13–15]. Для проверки этого утверждения был проведен расчет населенностей состояний с  $k \geq 40$  с помощью решения системы кинетических уравнений баланса.

На рис. 3 представлены результаты этого расчета, а также сравнение с результатами работ [13–15] в интервале времени, когда разлет атомного облака еще не оказывает существенного влияния на ход рекомбинации. Также показана экспериментально измеренная суммарная населенность уровней с главным квантовым числом от 40 до 100. Видно, что использование классических вероятностей в области ультранизких температур приводит к расхождению результатов расчета с экспериментом [6]. С другой стороны, использование для решения системы кинетических уравнений баланса предложенных вероятностей

существенно увеличивает число возбужденных атомов и приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными.

В диссертации показано, что корректный учет вероятностей процессов, заселяющих нижние ридберговские уровни при  $T_e \rightarrow 0$ , позволяет определить функцию распределения электронов в области рекомбинационного хвоста в случае большого значения параметра кулоновской неидеальности.

В **третьей главе** при помощи решения системы кинетических уравнений баланса исследуется процесс столкновительной рекомбинации в ультрахолодной системе ридберговских частиц. Учитывая, что коэффициент трехчастичной рекомбинации описывает скорость уменьшения числа свободных электронов, для системы однократно ионизованных атомов можно записать

$$\frac{dn_e}{dt} = -n_e^3 \alpha \quad (5)$$

Сравнивая это выражение с уравнением (2), нетрудно видеть, что при решении системы кинетических уравнений баланса можно определить рекомбинационный поток свободных электронов в область связанных состояний

$$j = \frac{d}{dt} \sum_k n_k(t) = -\frac{dn_e}{dt} \quad (6)$$

Проведенная в диссертации оценка характерных времен показывает, что для модели невзаимодействующих ридберговских атомов при условиях  $T_e \lesssim 10$  К и  $n_e \sim 10^8 - 10^{12}$  см<sup>-3</sup> характерна квазиравновесная динамика процессов. Это означает, что при решении системы кинетических уравнений баланса рассматриваются такие интервалы времени, в течение которых, по мере развития нестационарного процесса заселения двухчастичных состояний, концентрация возбужденных атомов успевает подстраиваться под сравнительно медленно меняющиеся параметры  $n_e$  и  $T_e$ . Тогда можно считать, что  $n_k$  не зависит от времени явно, а только через зависимости  $n_e(t)$  и  $T_e(t)$ . Слабая зависимость числа возбужденных атомов от времени позволяет считать поток электронов в область

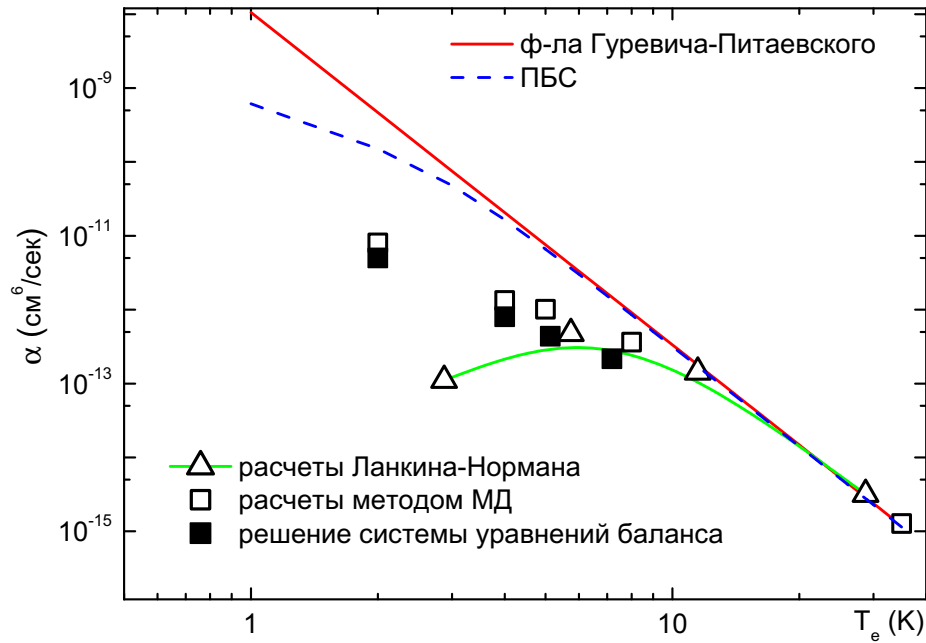


Рис. 4. Результаты расчетов коэффициента рекомбинации

связанных состояний квазистационарным.

На основании вышесказанного коэффициент рекомбинации для различных температур с использованием значений электронных потоков может быть определен как

$$\alpha = \frac{1}{\tilde{n}_e^3} \frac{dn_e}{dt} \quad (7)$$

На рис. 4 показано сравнение полученных в диссертации значений коэффициента рекомбинации с результатами расчетов методом молекулярной динамики и другими аналитическими выражениями. Прямая линия, классический закон рекомбинации “9/2”, соответствует выражению, полученному Гуревичем и Питаевским в [16]. Штриховая линия описывается формулой, полученной в работе [17] для системы многократно ионизованных атомов в приближении ближайшего соседа при большом значении параметра кулоновской неидеальности. Светлыми квадратами на рис. 4 отмечены результаты расчета методом молекулярной динамики [10]. Черными квадратами показаны результаты, полученные с помощью формулы (7) с использованием рекомбинационных потоков. Видно, что значения коэффициента рекомбинации, рассчитанные обоими способами хорошо согласуются друг с другом. Наконец, треугольниками представлены результаты расчета методом молекулярной динамики [18] для модели, в кото-

рой коэффициент рекомбинации определялся по количеству образовавшихся в процессе соударений связанных пар.

Анализ приведенных данных показывает, что в случае малого параметра кулоновской неидеальности, когда  $\gamma_e < 0.2$ , аналитические приближения и результаты численных расчетов хорошо согласуются и выполняется закон “9/2”. С уменьшением температуры, что соответствует росту  $\gamma_e$ , зависимость коэффициента рекомбинации, рассчитанного численно, начинает отличаться от закона “9/2”. Причем, коэффициент рекомбинации, определенный по формуле (7), монотонно убывает, а результаты [18] проходят через максимум в районе  $\gamma_e \sim 1$ . Дальнейшее резкое падение коэффициента рекомбинации, полученное в [18], объясняется особенностями выбранного потенциала взаимодействия разноименно заряженных частиц.

В то же время полученная в диссертации зависимость  $\alpha$  от температуры не так резко, но отличается от закона “9/2”. При этом уже при  $T_e \sim 1$  К отличие может достигать трех порядков в сторону уменьшения. Это означает, что с ростом параметра кулоновской неидеальности наблюдается существенное замедление столкновительной рекомбинации. Это может быть объяснено тем, что с уменьшением температуры растет населенность многочастичных состояний. Время задержки электронов в этой области увеличивается, что приводит к уменьшению скорости рекомбинационного потока в область ридберговских состояний. В этом смысле можно говорить о формировании системы ультрахолодных ридберговских частиц в области многочастичного взаимодействия. Кроме того, проведенная с учетом сильного замедления рекомбинации оценка характерных времен столкновений позволяет говорить о возможности образовании порядка в системе ультрахолодных ридберговских частиц.

Согласованность результатов расчета методом кинетических уравнений баланса с методом молекулярной динамики подтверждает применимость диффузионного приближения для рассмотрения кинетики заселения ридберговских состояний. Для расчета коэффициента диффузии  $D(E)$  в области ридберговских состояний электрона нет необходимости решать систему кинетических

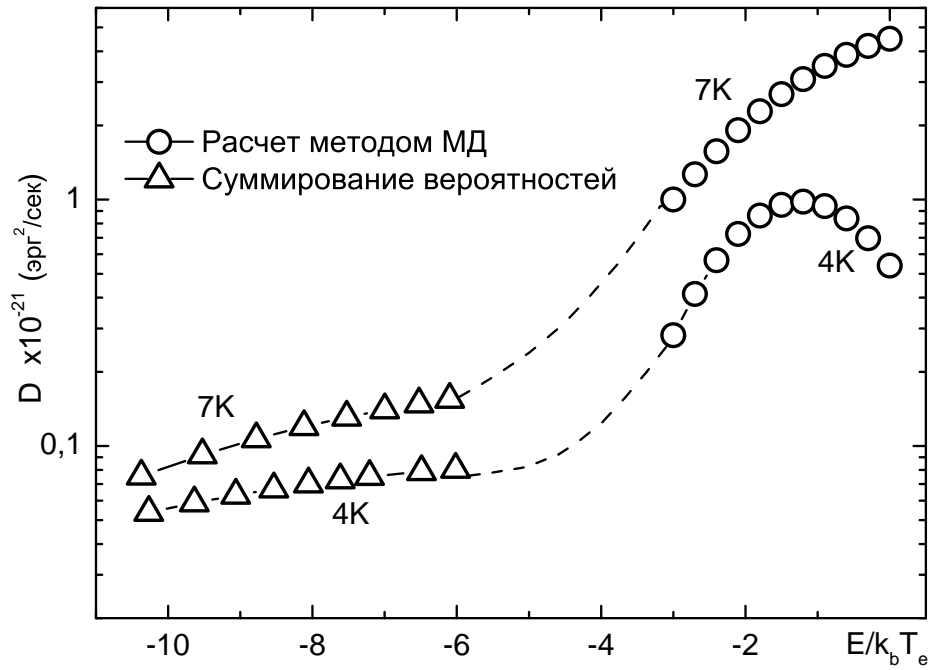


Рис. 5. Результаты расчета коэффициента диффузии электронов в пространстве энергий для различных температур методом молекулярной динамики (кружки) и путем суммирования вероятностей переходов (треугольники)

уравнений баланса. Для этого достаточно знать вероятности переходов между связанными состояниями, причем коэффициент диффузии имеет смысл рассматривать только для энергий перехода, меньших  $k_b T_e$ . Кроме того, используемые при решении системы уравнений (1)-(3) вероятности таковы, что они максимальны при переходе электрона на соседний уровень и быстро затухают при переходе в более далекие по спектру состояния, что также удовлетворяет условиям диффузионного приближения. Суммирование вероятностей перехода вверх и вниз по спектру дает возможность определить  $D(E)$  в области ридберговских состояний электрона

На рис. 5 приведены результаты расчетов  $D(E)$  путем суммирования вероятностей и методом молекулярной динамики для различных значений температуры электронов. Значение коэффициента диффузии, рассчитанное методом молекулярной динамики, имеет тенденцию к уменьшению в области ридберговских состояний электрона. Однако, подобный подход не обеспечивает необходимой точности при значениях энергии  $E/k_b T_e \lesssim -4$ . С другой стороны, суммирование вероятностей переходов дает возможность определить  $D(E)$  в области двухчастичных водородоподобных состояний. Как видно на рис. 5, ре-



зультаты расчета описанными способами близки друг к другу, что позволяет рассчитать коэффициент диффузии во всей области связанных состояний, где диффузионное приближение применимо.

В **четвертой главе** разработан новый способ определения температуры и плотности свободных электронов по известным населенностям связанных состояний в ультрахолодной системе ридберговских частиц. В настоящее время экспериментальные исследования подобных систем затруднены из-за отсутствия надежных прямых методов диагностики [19,20]. Для определения температуры электронов используются косвенные методы различной степени точности, отсутствуют способы определения плотности свободных электронов. Кроме того, описанные в литературе методики применимы только в случае слабой неидеальности [21]. Для предлагаемого метода обоснована его применимость в широкой области значений параметра кулоновской неидеальности. В случае малого значения  $\gamma_e$  температуру и плотность свободных электронов можно определить по измеренным населенностям трех состояний  $n_{k_1}$ ,  $n_{k_2}$  и  $n_{k_3}$  [22]. Рассматривая эти состояния в порядке убывания их энергии связи  $E_{k_3} < E_{k_2} < E_{k_1}$ , для температуры свободных электронов можно записать уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{n_{k_2}}{g_{k_2}} \exp\left(\frac{E_{k_2}}{k_b T_e}\right) (\chi_{k_1} - \chi_{k_3}) = \\ = \frac{n_{k_1}}{g_{k_1}} \exp\left(\frac{E_{k_1}}{k_b T_e}\right) (\chi_{k_2} - \chi_{k_3}) + \frac{n_{k_3}}{g_{k_3}} \exp\left(\frac{E_{k_3}}{k_b T_e}\right) (\chi_{k_1} - \chi_{k_3}), \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\chi_k = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{E_k/k_b T_e} e^{-t} t^{3/2} dt$$

функция, определяющая отклонение населенности  $k$ -го состояний от равновесного значения. Численное решение уравнения (8) позволяет определить температуру свободных электронов.

Аналогично можно записать выражение, связывающее населенности двух возбужденных уровней и плотность свободных электронов:

$$\frac{n_{k_2}}{g_{k_2}} \exp\left(\frac{E_{k_2}}{k_b T_e}\right) \chi_{k_1} = \frac{n_{k_1}}{g_{k_1}} \exp\left(\frac{E_{k_1}}{k_b T_e}\right) \chi_{k_2} + \frac{n_e^2}{g_e g_i} \lambda_e^3 (\chi_{k_1} - \chi_{k_2}) \quad (9)$$

Уравнения (8) и (9) позволяют определить температуру и плотность свободных электронов в ультрахолодной системе ридберговских частиц в случае малого значения  $\gamma_e$ . Однако в экспериментах при начальных температурах  $T_e^0 = 1 - 30$  К и плотностях  $n_e^0 = 10^9 - 10^{10}$  см<sup>-3</sup> параметр кулоновской неидеальности может достигать значения 23 [4–6]. В случае, когда  $\gamma_e \geq 1$ , описанный способ определения  $T_e$  и  $n_e$  становится неприменим.

Смещение функции распределения (см. рис. 2) за счет понижения средней полной энергии при уменьшении температуры электронов обуславливает изменение положения узкого места спектра. При этом область равновесной населенности связанных состояний также смещается в сторону более отрицательных энергий. Это смещение пропорционально значению параметра кулоновской неидеальности.

Следовательно, переопределение с учетом  $\gamma_e$  значений энергии, ограничивающих группу равновесно населенных состояний, дает возможность воспользоваться выражениями (8) и (9) для определения температуры и плотности свободных электронов в случае сильной неидеальности системы ридберговских части. В этом случае для заданных в эксперименте начальных значений  $T_e^0$  и  $n_e^0$  нужно рассчитать функцию распределения электронов и определить область энергий, отвечающих квазиравновесным ридберговским состояниям. Измеряя населенности по крайней мере трех состояний из этой области на основании (8) и (9) можно рассчитать значения  $T_e$  и  $n_e$ . При этом в качестве функции, задающей отклонение населенности выбранного состояния от равновесного значения можно использовать

$$\tilde{\chi}_k = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{\delta E}^{\delta E + E_k/k_b T_e} e^{-t^3/2} dt, \quad (10)$$

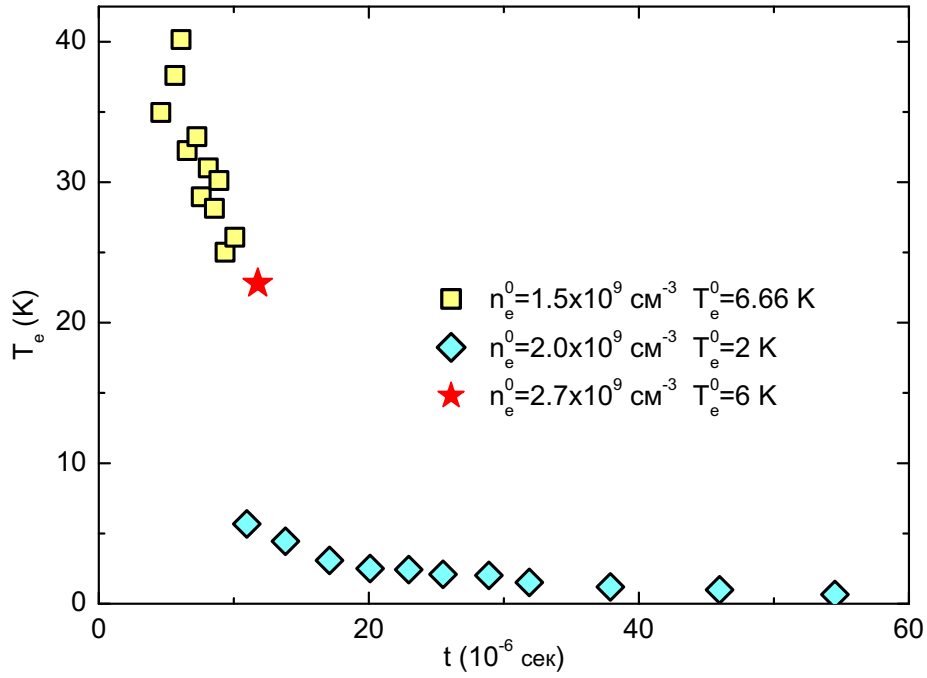


Рис. 6. Зависимость температуры электронов от времени для различных начальных значений температуры и плотности свободных электронов. Квадратами отмечены результаты экспериментальных измерений [19], ромбами представлены данные работы [20]. Звездочка — результат решения системы уравнений (8)–(9)

где  $\delta E$  задает смещение узкого места спектра по шкале энергий. Величина этого смещения в диссертации оценивается как  $\delta E \simeq 2.5\gamma_e$ .

Для проверки предлагаемого метода был проведен расчет температуры свободных электронов для экспериментов [4–6] на основе опубликованных данных о населенности связанных состояний и проведено сравнение с результатами экспериментальной диагностики ультрахолодной системы ридберговских частиц [19, 20]. На рис. 6 представлены результаты измерения температуры электронов в зависимости от времени и начальных параметров  $T_e^0$  и  $n_e^0$ . Видно, что полученное при решении уравнения (8) значение  $T_e$  хорошо согласуется с результатами экспериментальных исследований.

Проведенный в диссертации анализ позволяет утверждать, что с помощью предлагаемого метода можно надежно и достаточно просто определить температуру и плотность свободных электронов по известным населенностям связанных состояний, в случае малого параметра кулоновской неидеальности. Кроме того, проведенное обобщение на случай сильной неидеальности ультрахолодной

системы ридберговских частиц позволяет использовать предлагаемый способ в тех случаях, когда существующие экспериментальные методики неприменимы [19, 20]. Это обстоятельство важно для дальнейшего исследования кинетических процессов при более низких температурах.

В **заключении** перечислены

## Основные выводы диссертационной работы

1. Показано, что корректный учет многочастичных состояний позволяет перейти от решения уравнений движения для свободных электронов и ионов методом молекулярной динамики к рассмотрению возбужденных состояний изолированного атома. На основе этого рассчитана рекомбинационная часть функции распределения электронов по энергиям в неравновесной ультрахолодной системе ридберговских частиц методом решения системы кинетических уравнений баланса.
2. Для описания кинетики заселения связанных состояний с энергией  $E \ll k_b T_e$  предложены полуэмпирические вероятности перехода между связанными  $S$  состояниями ридберговского атома при взаимодействии с медленным свободным электроном, обладающие корневой зависимостью при стремлении энергии свободного электрона к нулю.
3. Получена функция распределения состояний электрона в области  $E \ll k_b T_e$  при помощи решения системы кинетических уравнений баланса с использованием предложенных вероятностей перехода. Используя данные, полученные методом молекулярной динамики, была построена полная функция распределения электронов в ультрахолодной неравновесной неидеальной системе ридберговских частиц в диапазоне температур  $T_e = 1 - 10$  К и плотностей  $n_e = 10^9 - 10^{11}$  см<sup>-3</sup>.
4. Получена температурная зависимость коэффициента рекомбинации на основе рассчитанных рекомбинационных потоков свободных электронов. В

пределах расчетной ошибки коэффициент рекомбинации, полученный методом решения системы кинетических уравнений баланса, совпадает с коэффициентом рекомбинации, рассчитанным методом молекулярной динамики, что подтверждает предположение о замедлении рекомбинации.

5. Предложен новый метод определения температуры и концентрации свободных электронов в ультрахолодной неравновесной неидеальной системе ридберговских частиц по экспериментально измеренной населенности связанных ридберговских состояний. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

## Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

### Статьи

1. Зеленер Б.В., Зеленер Б.Б., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Взаимодействие ридберговских атомов с медленными электронами // Физическое образование в ВУЗах, Физика. 2010. Т. 16. стр. 116–122.
2. Бобров А.А., Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Коэффициент столкновительной рекомбинации в ультрахолодной плазме. Расчет методом молекулярной динамики // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 605–612.
3. Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Функция распределения и диффузия в пространстве энергий ридберговских состояний электрона в неидеальной ультрахолодной плазме // ЖЭТФ. 2011. Т.139. С. 822–828.

## Тезисы конференций и публикации в сборниках

1. Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Взаимодействие ридберговских атомов с медленными электронами // В сб. аннотаций VII Курчатовской молодежной школы РНЦ КИ. 2009. С. 309
2. Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Взаимодействие ридберговских атомов с медленными электронами // В сб. аннотаций XXXVII Международной конференции по физике плазмы и УТС. 2010. С. 293
3. Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Рекомбинация в ультрахолодной плазме // В сб. трудов Научной Сессии НИЯУ МИФИ. 2010. Т. 3. С.105–108.
4. Bobrov A.A., Khikhlukha D.R., Zelener B.V., Zelener B.V. Nonequilibrium distribution function of electron and temperature dependence for recombination coefficient in ultracold plasma // In Abstracts of XXV International Conference on Equations of State for Matter. 2010. P. 154.
5. Бобров А.А., Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Функция распределения и кинетические процессы в ультрахолодной неидеальной плазме // В сб. аннотаций VIII Курчатовской молодежной школы РНЦ КИ. 2010. С. 169
6. Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Функция распределения и кинетические процессы в ультрахолодном ридберговском веществе // В сб. трудов Научной Сессии НИЯУ МИФИ. 2011. Т. 2. С. 64.

7. Бобров А.А., Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р. Функция распределения и кинетические процессы в сильнонеидеальной ультрахолодной плазме // В сб. аннотаций XXXVIII Международной конференции по физике плазмы и УТС. 2011. С. 293.
8. Bobrov A.A., Khikhlukha D.R., Zelener B.B., Zelener B.V. The influence of uniform magnetic field on the electron distribution function and recombination in an ultracold plasma // In Abstracts of XXVI International Conference on Equations of State for Matter. 2011. P. 159

# Список литературы

1. *Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П.* О коллективном электронном состоянии в системе сильновозбужденных атомов // ДАН СССР. 1981. Т. 260. С. 1096.
2. *Манькин Э.А., Ожован М.И., Полуэктов П.П.* Теория конденсированного состояния в системе возбужденных атомов цезия // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 442–453.
3. *Phillips W.D.* Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms // Rev. Mod. Phys. 1998. Vol. 70. Pp. 721–741.
4. *Killian T.C., Kulin S., Bergeson S.D., Orozco L.A., Orzel C., Rolston S.L.* Creation of an Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. Pp. 4776–4779.
5. *Kulin S., Killian T. C., Bergeson S. D., Rolston S. L.* Plasma Oscillations and Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. Pp. 318–321.
6. *Killian T. C., Lim M. J., Kulin S., Dumke R., Bergeson S. D., Rolston S. L.* Formation of Rydberg Atoms in an Expanding Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. Pp. 3759–3762.
7. *Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А.* Кинетические процессы в неидеальной ридберговской материи // ЖЭТФ. 2004. Т. 126. С. 1344–1354.
8. *Bobrov A.A., Manykin E.A., Zelener B.B., Zelener B.V.* Recombination



Properties of Rydberg Nonequilibrium Plasma Created by Dye Laser // Laser Physics. 2007. Vol. 17. Pp. 415–419.

9. *Бобров А.А., Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А.* Электронная плотность состояний и коэффициент диффузии электронов в энергетическом пространстве в неидеальной неравновесной плазме // ЖЭТФ. 2008. Т. 139. С. 179–187.
10. *Бобров А.А., Бронин С.Я., Зеленер Б.Б., Зеленер Б.В., Манькин Э.А., Хихлуха Д.Р.* Коэффициент столкновительной рекомбинации в ультрахолодной плазме. Расчет методом молекулярной динамики // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 605–612.
11. *Mansbach P., Keck J.C.* Monte Carlo Trajectory Calculations of Atomic Excitation and Ionization by Thermal Electrons // Phys. Rev. 1969. Vol. 181. Pp. 275–289.
12. *Johnson L.C.* Approximation For Collisional And Radiative Transition Rates in Atomic Hydrogen // Astrophys. J. 1972. Vol. 174. Pp. 227–236.
13. *Robicheaux F., Hanson J.* Simulated expansion of an ultra-cold, neutral plasma // Physics of Plasmas. 2003. Vol. 10. Pp. 2217–2230
14. *Pohl T., Pattard T.* Electron–ion recombination in strongly coupled cold plasmas under nonequilibrium conditions // J. Phys. A. 2006. Vol. 39. Pp. 4571–4578.
15. *Pohl T., Pattard T., Rost J.M.* Kinetic modeling and molecular dynamics simulation of ultracold neutral plasmas including ionic correlations // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. Pp. 33416–33428.
16. *Гуревич А.В., Путаевский Л.П.* Коэффициент рекомбинации в плотной низкотемпературной плазме // ЖЭТФ. 1964. Т. 46. С. 1281–1284.

17. Воробьев В.С., Ликальтер А.А. Физические свойства сильновозмущенной плазмы // Химия плазмы/Под ред. Б.М. Смирнова. — М.: Энергоатомиздат, 1988. — Т. 15. С. 163–208.
18. Lankin A.V., Norman G.E. Crossover from bound to free states in plasmas // J. Phys. A. 2009. Vol. 42. Pp. 214032.
19. Roberts J.L., Fertig C.D., Lim M.J., Rolston S.L. Electron Temperature of Ultracold Plasmas // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. Pp. 253003–253007.
20. Fletcher R.S., Zhang X.L., Rolston S.L. Using Three-Body Recombination to Extract Electron Temperatures of Ultracold Plasmas // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. Pp. 145001–145005.
21. Castro J., Gao H., Killian T.C. Using sheet fluorescence to probe ion dynamics in an ultracold neutral plasma // Plasma Phys. Control. 2008. Vol. 50. Pp. 124011.
22. Воробьев В.С., Железняк М.Б. Определение концентрации и температуры электронов по абсолютной интенсивности спектральных линий в неравновесной плазме // Оптика и спектр. 1973. Т. 35. С. 619–625.