

На правах рукописи



Левашов Павел Ремирович

**Квантово–статистический расчет теплофизических
свойств веществ для интерпретации
ударно-волновых экспериментов и численного
моделирования воздействия лазерных импульсов на
вещество**

1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2022

Работа выполнена в *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединённом институте высоких температур РАН (ОИВТ РАН)*.

Официальные оппоненты: **Губин Сергей Александрович**

д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой химической физики НИЯУ МИФИ

Змитренко Николай Васильевич

д.ф.-м.н, доцент, главный научный сотрудник ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

Рыжков Сергей Витальевич

д.ф.-м.н., доцент, профессор кафедры Эб «Теплофизика» МГТУ им. Баумана

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук

Защита состоится «_____» _____ 2022 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета 24.1.193.01 при ФГБУН ОИВТ РАН, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, экспо-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБУН ОИВТ РАН, <https://jiht.ru>

Автореферат разослан «_____» _____ 2022 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.

А. В. Тимофеев

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Решение многочисленных фундаментальных и прикладных проблем в области физики, химии, геологии, астрономии и медицины, создание новых энергетических установок и устройств, авиационных и космических двигателей, современных образцов вооружения невозможны без знания теплофизических свойств широкого круга материалов. Стоящие перед человечеством задачи освоения околоземного космического пространства, борьбы с загрязнением окружающей среды, создания новых материалов и технологий на их основе предъявляют все более жёсткие требования как к точности информации о свойствах вещества, так и к диапазону температур и давлений, в котором эти свойства должны быть измерены или рассчитаны. В традиционном стационарном теплофизическом эксперименте надёжные измерения можно производить при температурах до 2500 К и давлениях до нескольких килобар. С использованием алмазных наковален сегодня можно достичь давлений свыше 5 Мбар при температурах вблизи комнатной. Существенно расширить этот диапазон позволяют импульсные эксперименты, однако получаемая в них информация либо не обладает полнотой, либо точность измерений оказывается невысокой. В частности, в ударно-волновых экспериментах температуру внутри образца можно оценить только для прозрачных веществ по электромагнитному излучению, а в экспериментах по электровзрыву проводников достаточно сложно контролировать однородность образцов. Наибольшую проблему составляет, однако, тот факт, что в импульсных экспериментах измерения можно проводить только вдоль определённых линий на фазовой диаграмме: ударных адиабат сплошных и пористых образцов, изоэнтроп сжатия и расширения, повторных ударных адиабат и некоторых других. Подобные разрозненные данные затрудняют построение широкодиапазонных моделей теплофизических свойств, внося значительную неопределённость при численном моделировании. В последние десятилетия в связи с бурным развитием компьютерной техники и численных методов появились подходы, позволяющие непосредственно вычислять такие теплофизические свойства, как теплоёмкость, коэффициент теплового расширения, электронную теплопроводность и некоторые другие без привлечения эмпирической информации. Эти подходы, несмотря на их приближённый характер, обеспечивают хорошее согласие с экспериментом и обладают убедительными предсказательными свойствами. В частности, отличные результаты показывает метод квантовой молекулярной динамики, с помощью которого впервые удалось описать ударно-волновых эксперименты в конденсированных веществах. Таким образом, актуальность данной

работы состоит в использовании современных подходов для вычисления теплофизических свойств веществ в широком диапазоне температур и плотностей, в теоретической интерпретации экспериментальных данных для конденсированного вещества, в использовании результатов расчётов для создания полуэмпирических моделей теплофизических свойств и в применении подобных моделей для численного моделирования процессов при высоких плотностях энергии.

Степень разработанности темы исследования. Тема исследования разработана в достаточной степени: выполнен краткий обзор квантово-статистических методов, применяющихся для практических расчётов; проведено моделирование теплофизических свойств по моделям среднего атома, методу Монте–Карло с интегралами по траекториям, методу функционала плотности и методу квантовой молекулярной динамики; выполнена интерпретация ударно-волновых экспериментов для ряда веществ; созданы компьютерные коды для проведения вычислений термодинамических функций по конечно–температурной модели Томаса–Ферми, а также электронных транспортных свойств по формуле Кубо–Гринвуда; созданы широкодиапазонные уравнения состояния металлов на основе модели Томаса–Ферми; с использованием разработанных моделей выполнено континуальное двухтемпературное моделирование воздействия лазерного излучения на различные мишени с учётом переноса излучения. Следует отметить, что в диссертации представлен полный цикл многомасштабного моделирования: от квантовых расчётов с участием нескольких сотен частиц до макроскопического континуального моделирования методами механики сплошной среды.

Цели и задачи диссертационной работы:

1. Расчёт тепловой части термодинамических функций по моделям Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов с заданной точностью, включая вторые производные термодинамического потенциала.
2. Построение полуэмпирических широкодиапазонных уравнений состояния металлов с тепловым вкладом электронной подсистемы по модели Томаса–Ферми при конечной температуре.
3. Расчёт термодинамических функций смеси водорода с гелием методом Монте–Карло с интегралами по траекториям.
4. Расчёт кривых плавления металлов на основе метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана.

5. Расчёт кривых плавления металлических кристаллов в зависимости от электронной температуры методом функционала плотности.
6. Исследование пределов применимости псевдопотенциалов в методе функционала плотности и квантовой молекулярной динамики.
7. Моделирование ударно-волновых экспериментов для металлов, дейтерия и LiD.
8. Расчет транспортных и оптических свойств плотной плазмы с помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда, в том числе в двухтемпературном приближении.
9. Проведение континуального численного моделирования воздействия мощных лазерных импульсов на различные мишени.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Разработана методика вычисления тепловой части термодинамических функций с заданной точностью по моделям Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, в том числе для вторых производных термодинамического потенциала.
2. Разработан программный код для вычисления тепловой части термодинамических функций для моделей Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, разработан графический интерфейс для вычисления таблиц термодинамических функций.
3. Разработаны полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния для ряда металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется модель ТФКТ.
4. Проведены расчёты термодинамических функций смеси водорода с гелием при температурах выше 10 кК с помощью метода Монте-Карло с интегралами по траекториям.
5. Проведены расчёты кривых плавления алюминия, меди и никеля с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана.

6. С помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана проведены расчеты температуры плавления в зависимости от электронной температуры для металлических кристаллов различной плотности с нагретыми электронами.
7. Проведено сравнение результатов вычисления холодных кривых, теплового давления и электронной теплоёмкости для металлов с помощью псевдопотенциального и полноэлектронного методов функционала плотности.
8. Проведено моделирование ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и LiD.
9. Проведены расчёты транспортных и оптических свойств плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 с помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда, в том числе в двухтемпературном приближении.
10. Проведено одномерное гидродинамическое моделирование воздействия мощного лазерного импульса на тонкую плёнку, установленную перед мишенью, с учётом переноса излучения.

Научная новизна.

1. Впервые разработан метод расчёта тепловой части термодинамических функций моделей Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, включая вторые производные термодинамического потенциала.
2. Впервые построены полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния металлов с тепловым вкладом электронной подсистемы по модели Томаса–Ферми при конечной температуре, для которых продемонстрировано описание экспериментальных данных для пористых образцов, изоэнтроп расширения и данных по скорости звука.
3. Впервые с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана выполнен расчёт кривых плавления металлических кристаллов различной плотности с нагретой электронной подсистемой; продемонстрирована немонотонность зависимости температуры плавления от электронной температуры.

4. Впервые проведено количественное исследование области применимости псевдопотенциалов в методе функционала плотности на основе сравнения псевдопотенциального и полноэлектронного подходов.
5. Впервые на примере LiD сформулирован критерий применимости псевдопотенциалов в методе квантовой молекулярной динамики.
6. Впервые продемонстрировано, что метод квантовой молекулярной динамики способен описать все типы ударно-волновых экспериментов для алюминия.
7. Для плотной плазмы эффективного состава CH_2 на основе первопринципных расчётов впервые выявлены особенности электронных транспортных свойств в диапазоне температур от 5 до 100 кК.
8. Для плотной плазмы алюминия на основе первопринципных расчётов впервые выявлены особенности электронной статической электропроводности и теплопроводности в двухтемпературном приближении в диапазоне температур от 3 до 20 кК.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, представленные в диссертации, вносят существенный вклад в область изучения и применения теплофизических свойств веществ. В частности, были разработаны новые теоретические подходы для вычисления теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми для смеси веществ, включая вторые производные термодинамического потенциала; был предложен метод исследования области применимости псевдопотенциалов для метода функционала плотности, метод расчёта кривых плавления кристаллов с нагретыми электронами, методы расчёта изоэнтроп сжатия и разгрузки по результатам атомистического моделирования; выполнена теоретическая интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов. Диссертация также обладает и практической значимостью: был разработан компьютерный код с графическим интерфейсом для расчёта теплового вклада электронов для смеси веществ по конечно-температурной модели Томаса–Ферми, а также параллельный код для вычисления транспортных свойств по формуле Кубо–Гринвуда; были рассчитаны подробные таблицы термодинамических свойств электронов и создан новый класс широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов без коррекции электронного вклада; были рассчитаны кривые плавления металлов в широком диапазоне давлений; была рассчитана температура и другие термодинамические параметры при моделировании ударно-волновых экспериментов для ряда веществ; были рассчитаны

электронные транспортные свойства для плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 ; численно была изучена проблема подавления лазерного предимпульса с помощью тонкой плёнки, устанавливаемой перед мишенью.

Методология и методы исследования. Методология исследований, выполненных в диссертационной работе, основана на принципах квантовой статистической физики и компьютерном моделировании. Были использованы различные расчётно-теоретические методы: конечно-температурная модель Томаса-Ферми для смеси веществ, метод Монте-Карло с интегралами по траекториям, метод функционала плотности, метод квантовой молекулярной динамики, формула Кубо-Гринвуда для вычисления электронных транспортных свойств, двухтемпературная континуальная модель для описания воздействия лазерного излучения на вещество с учётом переноса излучения. Для достижения отдельных целей диссертации привлекались асимптотические разложения для термодинамических функций модели Томаса-Ферми, метод Ферми-Зельдовича для расчёта изоэнтроп, квазигармоническое приближение для вычисления фононного вклада в термодинамические функции кристалла, результаты расчётов по химической модели плазмы для смеси водорода с гелием; полуэмпирические аппроксимации для описания холодных кривых и ионного вклада в широкодиапазонные уравнения состояния металлов.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод расчёта тепловой части термодинамических функций, включая вторые производные термодинамического потенциала, для модели Томаса-Ферми для смеси веществ.
2. Модель уравнения состояния металлов с тепловым вкладом электронов по модели Томаса-Ферми.
3. Результаты моделирования кривых плавления металлических кристаллов различной плотности методом функционала плотности в зависимости от температуры электронов.
4. Критерий применимости псевдопотенциалов в методе квантовой молекулярной динамики.
5. Результаты моделирования ударно-волновых экспериментов для алюминия и LiD методом квантовой молекулярной динамики.
6. Транспортные свойства плотной плазмы алюминия, вычисленные с помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда, в двухтемпературном приближении.

Степень достоверности и апробация результатов. Степень достоверности результатов, изложенных в диссертации, высокая. Все результаты, полученные в диссертации, основаны на принципах квантовой статистической физики и методе функционала плотности, имеющих строгое теоретическое обоснование. Результаты численного моделирования исследовались на сходимость и сравнивались с альтернативными моделями и экспериментом.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

- Международная конференция «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество», пос. Эльбрус, Россия, 1–6 марта 2001, 2003, 2005, 2007 гг.;
- International Conference “Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter”, Elbrus, Russia, March 1–6, 2009, 2011, 2013, 2015, 2017, 2019, 2021 гг.;
- Международная конференция «Уравнения состояния вещества», пос. Эльбрус, Россия, 1–6 марта 2002, 2004, 2006, 2008 гг.;
- International Conference “Equations of State for Matter”, Elbrus, Russia, March 1–6, 2010, 2012, 2014, 2016, 2018, 2020 гг.;
- Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу, г. Звенигород, Россия, 16–20 февраля 2004 г., 14–18 февраля 2005 г., 13–17 февраля 2006 г., 11–15 февраля 2008 г., 9–13 февраля 2009 г., 10–14 февраля 2014 г.; 15–19 марта 2021 г.
- Международная конференция «Харитоновские тематические научные чтения», г. Саров, Россия, 17–21 марта 2003 г., 14–18 марта 2005 г., 12–16 марта 2007 г., 11–14 марта 2008 г., 16–20 марта 2009 г., 18–22 марта 2013 г., 21–25 апреля 2014 г., 19–22 апреля 2016 г.;
- Международная конференция «Забабахинские научные чтения», г. Снежинск, Россия, 5–10 сентября 2005 г., 10–14 сентября 2007 г., 15–19 марта 2010 г., 16–20 апреля 2012 г., 2–6 июля 2014 г., 20–24 марта 2017 г.;
- Joint 19th AIRAPT — 41st EHPRG International Conference “High Pressure Science and Technology”, Bordeaux, France, July 7–11, 2003;
- 42nd EHPRG International Conference “High Pressure Science and Technology”, Lausanne, Switzerland, September 1–4, 2004;
- Joint 20th AIRAPT — 43th EHPRG International Conference on High Pressure Science and Technology, Karlsruhe, Germany, June 27 – July 1 2005;
- Joint 21st AIRAPT and 45th EHPRG International Conference on High Pressure Science and Technology, Catania, Italy, September 17–21, 2007;
- 46th EHPRG International Conference, Valencia, Spain, September 7–12, 2008;

- 48th EHPRG International Conference, Uppsala, Sweden, July 25–29, 2010;
- International Conference on High Pressure Science and Technology “Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50”, Tokio, Japan, July 26–31, 2009;
- 49th EHPRG International Conference, Budapest, Hungary, 28 Aug – 2 Sep 2011;
- International Conference on High Pressure Science and Technology AIRAPT-23, Mumbai, India, September 25–30, 2011;
- International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems, Moscow, Russia, June 20–25, 2005;
- International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems, Camerino, Italy, 29 July – 2 August 2008;
- International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems, Budapest, Hungary, July 24-29, 2011;
- 31st European Physical Society Conference on Plasma Physics, London, UK, 28 June – 2 July 2004;
- 33rd European Physical Society Conference on Plasma Physics, Roma, Italy, June 19–23, 2006;
- 35th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Hersonissos, Crete, Greece, 9—13 June, 2008;
- 37th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Dublin, Ireland, 20–25 June, 2010;
- V Международная научная школа–семинар «Импульсные процессы в физике сплошных сред», Николаев, Украина, 19–23 августа 2003 г., 22–26 августа 2005 г., 21–25 августа 2007 г., 17–21 августа 2009 г.;
- International Conference “Shock Waves in Condensed Matter”, St. Petersburg, Russia, 18–23 July 2004;
- International Conference “New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter”, Dijon, France, April 9–14, 2006;
- International Meeting on New Models and Hydrocodes for Shock Waves Processes in Condensed Matter, Estoril, Portugal, May 18–23, 2008;
- International Conference on New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Paris, France, May 24—28, 2010;
- 10th Seminar on New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Pardubice, Czech Republic, July 27 – August 1, 2014;
- 13th International conference on Liquid and Amorphous Metals, Ekaterinburg, Russia, July 9–13, 2007;
- XIV Liquid and Amorphous Metals Conference, Rome, Italy, July 11—16, 2010;

- 16th International Conference on Liquid and Amorphous Metals (LAM-16), Bonn – Bad Godesberg, Germany, September 4–9, 2016;
- XIII International Conference on Physics of Non-Ideal Plasmas, Chernogolovka, Russia, September 13–28, 2009;
- 16th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas, Saint-Malo, France, September 24–28, 2018;
- 18th Symposium on Thermophysical Properties, Boulder, USA, June 24–29, 2012;
- APS-SCCM & AIRAPT-24 Joint Conference, Seattle, USA, July 7–12 2013;
- Hirschegg Workshop on High Energy Density Physics with Intense Ion and Laser Beams, Waldemar-Petersen-Haus, Hirschegg, Austria, February 1–5 2010, January 30 – February 4 2011, January 29 – February 3 2012, January 13–18 2013;
- 8th International Workshop on Subsecond Thermophysics, Moscow, Russia, September 26–28, 2007;
- Научно-координационное совещание-симпозиум «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах», пос. Новый Афон, Республика Абхазия, Россия, 22 июля – 2 августа 2005 г., 23 июля – 1 августа 2007 г., 23 июля – 1 августа 2008 г., 23 июля – 1 августа 2009 г., 23 июля – 1 августа 2010 г., 2–11 августа 2012 г., 1–12 августа 2013 г.;
- Научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы», Москва, Россия, 3–4 декабря 2013 г., 2–3 декабря 2014 г., 7–8 декабря 2016 г., 29–30 ноября 2017 г., 15–19 октября 2018 г.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 25 печатных работах, из них 25 статей в рецензируемых журналах [1–25].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 8 глав, заключения, библиографии и 3-х приложений. Общий объем диссертации 271 страница, включая 88 рисунков и 7 таблиц. Библиография включает 469 наименований на 52 страницах.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе приведён краткий обзор существующих сегодня квантово-статистических подходов, которые активно применяются для расчётов теплофизических свойств широкого круга веществ. Введены основные понятия, используемые в диссертации. Рассмотрены хорошо известные модели идеального ферми-газа, Томаса-Ферми и Хартри-Фока в сферической ячейке при ненулевой температуре. Проанализированы также и многочастичные квантово-статистические методы: метод квантовой молекулярной динамики, безорбитальные подходы и метод Монте-Карло с интегралами по траекториям. Сделан вывод о том, что наиболее перспективным для практики является метод квантовой молекулярной динамики.

Во второй главе рассмотрена конечно-температурная модель Томаса-Ферми (ТФКТ) для расчёта термодинамических свойств электронов в веществе. В рамках этой модели для электронов в атоме используется квазиклассическое приближение; это означает, что спектр атома является непрерывным и не содержит дискретных уровней и запрещённых зон. По этим причинам модель Томаса-Ферми применима при очень высоких давлениях, сравнимых с атомной единицей давления. Термодинамические функции электронов в модели Томаса-Ферми удовлетворяют асимптотикам идеального больцмановского газа (при высоких температурах и удельных объёмах) и ферми-газа (при низких температурах и удельных объёмах). Однако вне пределов своей области применимости модель Томаса-Ферми даёт большие расхождения по сравнению с более точными моделями. По этой причине значительный практический интерес представляет исследование теплового вклада электронной подсистемы в термодинамические функции модели Томаса-Ферми как для одного элемента, так и для смесей.

Модель вещества, состоящего из атомов одного элемента, в приближении Томаса-Ферми сводится к рассмотрению точечного ядра в сферической ячейке, радиус которой определяется заданной плотностью. Электростатический потенциал электронов и ядра обращается в ноль на границе ячейки. Связь между электронной плотностью и потенциалом обеспечивается уравнением Пуассона. Математически эта проблема сводится к краевой задаче с граничными условиями на самосогласованный потенциал; также обеспечивается условие электронейтраль-

ности ячейки. Температура входит в модель через распределение Ферми–Дирака. Для конечно-температурной модели Томаса–Ферми можно записать свободную энергию, из которой получаются все необходимые термодинамические функции. Первые производные свободной энергии сводятся к интегрированию самосогласованного потенциала по объёму ячейки и могут быть относительно просто вычислены. Значительно сложнее вычислить вторые производные свободной энергии, которые необходимы для расчёта скорости звука или теплоёмкостей. Для этой цели в каноническом ансамбле нужно вычислить производные химического потенциала и электростатического потенциала по объёму и температуре. Этого можно достигнуть путём решения дополнительных краевых задач для производных электростатического потенциала. Для того, чтобы обеспечить высокую точность расчётов, используется специальная процедура: интегралы по электростатическому потенциалу сводятся к обыкновенным дифференциальным уравнениям. Эти уравнения затем решаются совместно с уравнением Томаса–Ферми (и его производным по объёму и температуре) с помощью специальных методов численного интегрирования с автоматическим выбором шага. Еще одна проблема возникает при расчёте теплового вклада в термодинамические функции. Тепловой вклад можно вычислить путём вычитания термодинамических функций при $T = 0$ К из термодинамических функций при ненулевой температуре и той же плотности, однако погрешность такой операции при невысоких температурах может быть значительной. В этой ситуации предпочтительно использовать асимптотические разложения термодинамических функций при низких температурах.

Для смеси элементов необходимо обеспечить равенство химических потенциалов для всех атомов смеси, что достигается варьированием объёмов ячеек для компонентов смеси при условии равенства суммарного объёма всех ячеек заданному объёму смеси. Если химический потенциал смеси при заданных температуре и объёме найден, то дальнейшие расчёты термодинамических функций смеси и отдельных компонент могут выполняться независимо для каждого атома смеси; производные химического потенциала по объёму и температуре вычисляются как результат аналитического решения системы линейных уравнений для частных производных для компонентов смеси. Выделение тепловой части производится аналогично модели для одного атома.

Для проведения расчётов термодинамических функций по модели Томаса–Ферми для смеси элементов (ТФСЭ) был разработан программный код TFMix с графическим интерфейсом. С помощью этого кода можно вычислить таблицу термодинамических функций в заданном интервале температур и плотностей как для всей

смеси, так и для отдельных её компонент, включая первые и вторые производные свободной энергии, а также средний заряд иона. В качестве примера на рис. 1 (слева) показано тепловое давление электронов плазмы эффективного состава CH_2 на трёх изотермах 100, 200 и 300 кК. На рис. 1 (справа) продемонстрировано главное окно графического интерфейса программы TFmix.

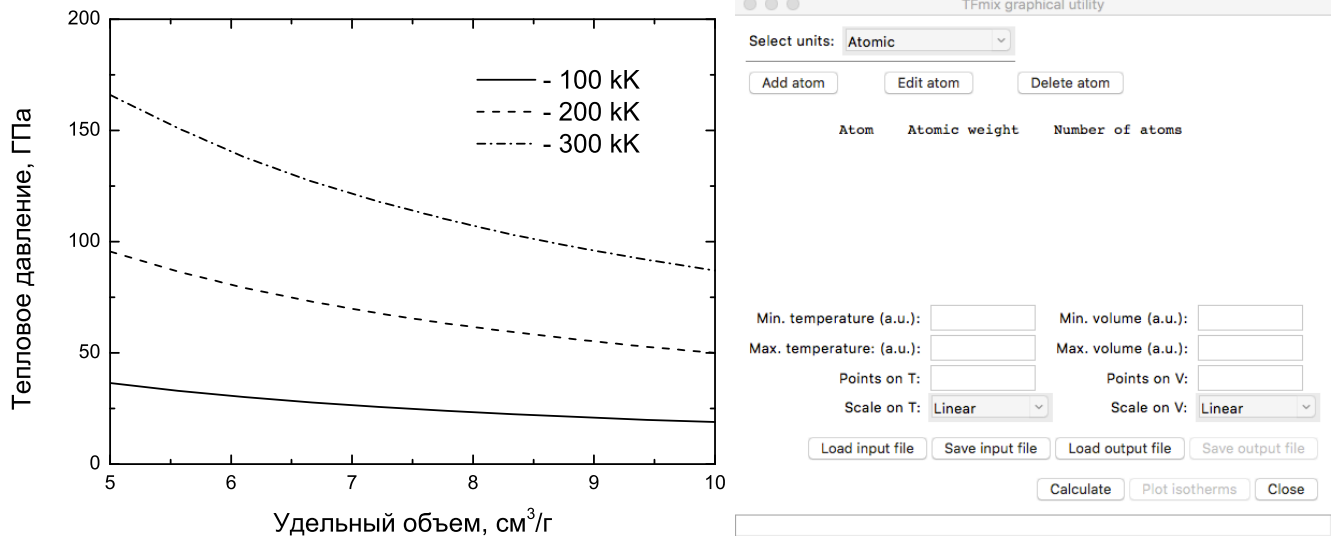


Рис. 1. Слева: тепловое давление электронов на изотермах плазмы эффективного состава CH_2 в зависимости от удельного объёма, рассчитанное с помощью модели ТФСЭ. — — $T = 100$ кК, - - - - $T = 200$ кК, - · - · - $T = 300$ кК. Справа: главное окно графического интерфейса программы TFmix.

Результаты второй главы опубликованы в работах [1; 2; 24].

В третьей главе сформулированы широкодиапазонные модели полуэмпирического уравнения состояния (УРС) с тепловой частью модели Томаса–Ферми для электронов. УРС в широком диапазоне термодинамических параметров необходимо для решения многих физических задач, в том числе связанных с воздействием мощных потоков энергии на вещество. Сегодня для построения широкодиапазонных УРС наиболее распространенным является полуэмпирический подход, в котором используются различные теоретические модели в областях их применимости, а согласие с экспериментальными данными достигается подбором численных параметров. Важным свойством полуэмпирических УРС является удовлетворение асимптотикам идеальных газов в пределе высоких температур и удельных объёмов, а также низких температур и удельных объёмов. Весьма сложной проблемой в теории полуэмпирических УРС является описание электронной подсистемы. Традиционно для этой цели используют модель идеального ферми–газа с фиксированным числом электронов. Существуют также более сложные варианты, в которых число свободных электронов меняется с температурой и плотностью

по некоторому закону, который, однако, в общем случае неизвестен. Более того, не существует однозначного определения понятия степени ионизации для плазмы высокой плотности. По этой причине для обеспечения согласованности числа свободных электронов с термодинамическими свойствами часто привлекают модель Томаса–Ферми или другие модели среднего атома для электронной подсистемы. Известно, что модель Томаса–Ферми неприменима при нормальных условиях, поэтому используются различные поправки: теоретические или эмпирические. Эти подходы, однако, менее удобны для практики, так как поправки могут принимать слишком большие значения в некоторых областях фазовой диаграммы и приводить к нефизическим результатам.

Для описания термодинамических свойств металлов использовалась свободная энергия F , которая в адиабатическом приближении представляется суммой трех слагаемых, отвечающих за холодное взаимодействие при $T = 0$ К (F_c) и тепловой вклад ядерной (F_a) и электронной (F_e) компонент,

$$F(V, T) = F_c(V) + F_a(V, T) + F_e(V, T), \quad (1)$$

при этом $F_a(V, T = 0) = 0$, $F_e(V, T = 0) = 0$. Такое представление позволяет использовать высокоточные аппроксимации для холодной кривой $F_c(V)$, а также различные модели для теплового вклада электронов F_e . На основе этого выражения были построены две модели, в которых первые два слагаемых заданы в виде интерполяционных выражений, а учет последнего осуществляется по модели Томаса–Ферми при конечной температуре, описанной в главе 2. В первой модели (УРС1) для описания теплового вклада ядерной компоненты использовалось выражение для свободной энергии в квазигармоническом приближении с учётом эффектов ангармонизма и полуэмпирическим выражением для зависимости характеристической температуры от объёма. Во второй модели (УРС2) использовалось упрощённое выражение для $F_a(V, T)$, в котором при $T \rightarrow 0$ энтропия не стремится к нулю, а теплоёмкость остаётся постоянной. По модели УРС1 были построены полуэмпирические уравнения состояния для алюминия и меди, а по УРС2 — магния, вольфрама и золота.

На рис. 2 (слева) показаны ударные адиабаты сплошных и пористых (с пористостью $m = \rho_{00}/\rho_0 = 3$) образцов меди. Рисунок демонстрирует хорошее согласие для ударных адиабат, рассчитанных по модели УРС1, с экспериментальными данными во всем исследованном диапазоне давлений.

На рис. 2 (справа) показана зависимость скорости звука за фронтом ударной волны в образцах меди нормальной начальной плотности от массовой скорости.

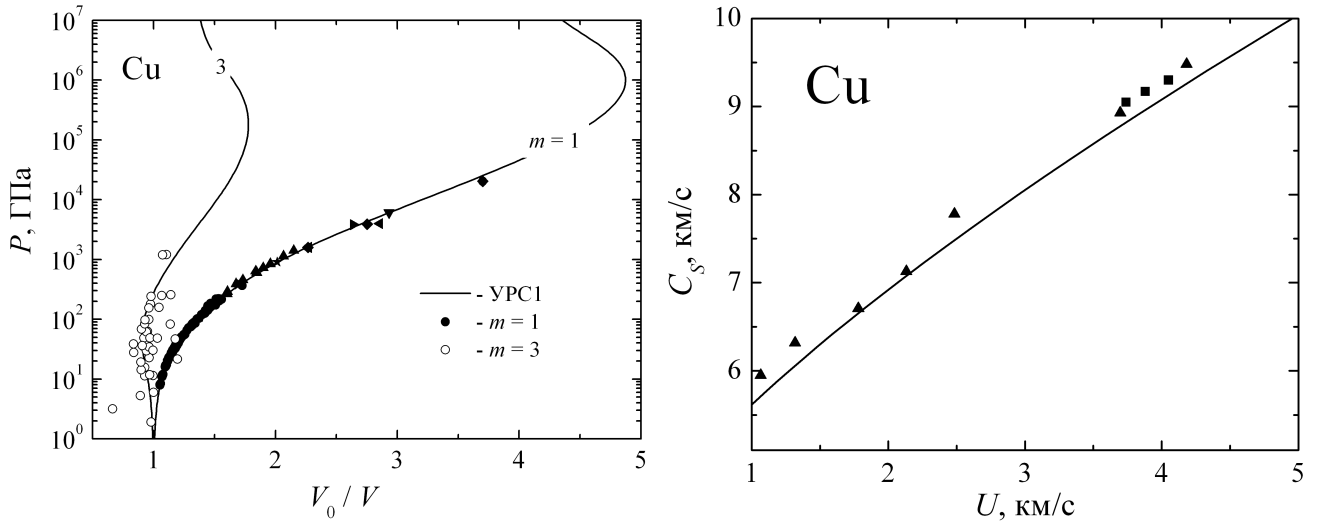


Рис. 2. Слева: ударные адиабаты меди в координатах давление–степень сжатия. — — расчёт по модели УРС1. Точки — экспериментальные данные: закрашенные значки — $m = 1$; \circ — $m = 3$. Справа: скорость звука за фронтом ударной волны в образцах меди нормальной плотности в зависимости от массовой скорости, — — расчёт по модели УРС1, \blacktriangle , \blacksquare — экспериментальные данные.

Видно, что модель УРС1 хорошо согласуется экспериментальными данными по этому параметру, это свидетельствует об адекватности выбранной формы уравнения состояния УРС1 для описания вторых производных термодинамического потенциала.

Результаты третьей главы опубликованы в работе [3].

В четвёртой главе описан метод Монте–Карло с интегралами по траекториям для моделирования смесей элементов.

Для решения многих астрофизических проблем требуется знание термодинамических свойств водорода и гелия. Так, при изучении различных явлений, происходящих в недрах планет-гигантов Юпитера и Сатурна и, в меньшей степени, коричневых карликов, уравнение состояния должно адекватно учитывать различные эффекты в диапазоне температур $10^3 < T < 10^5$ К и плотностей $0.01 < \rho < 100$ г/см³. В этой области вычисление термодинамических параметров существенно усложняется из-за влияния взаимодействия и вырождения электронов, а также диссоциации и ионизации давлением. Более того, в этих условиях было предсказано существование плазменного фазового перехода. Поэтому большой интерес представляют квантово-статистические первопринципные расчёты неидеальных вырожденных систем. В этой главе для исследования термодинамических свойств смеси водорода с гелием используется метод Монте-Карло с интегралами по траекториям (МКИТ), впервые сформулированный в работах Филинова В. С.

Метод МКИТ основан на фейнмановской формулировке квантовой механики, имеет строгое теоретическое обоснование и не использует специальных предположений для учета квантовых и обменно-корреляционных эффектов. Ядра атомов считаются классическими, а электроны — квантовыми. Пусть электронейтральная система содержит a различных сортов ядер и соответствующее количество электронов, при этом число ядер каждого сорта равно N_1, N_2, \dots, N_a , а заряды ядер Z_1, Z_2, \dots, Z_a , соответственно. Тогда число электронов равно $N_e = \sum_i N_i Z_i$. Термодинамические свойства такой системы в каноническом ансамбле описываются статистической суммой:

$$Z(N_e, N_1, \dots, N_a, V, \beta) = \frac{1}{N_e! N_1! \dots N_a!} \sum_{\sigma} \int_V dq dr \rho(q, r, \sigma; \beta), \quad (2)$$

где V — объём системы, $\beta = 1/k_B T$, T — температура, ρ — многочастичная матрица плотности системы (оператор плотности $\exp(-\beta \hat{H})$ в координатном представлении, где \hat{H} — гамильтониан системы), $q = \{\vec{q}_{11}, \dots, \vec{q}_{1N_1}, \dots, \vec{q}_{a1}, \dots, \vec{q}_{aN_a}\}$ координаты ядер, $r = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}\}$ координаты электронов, $\sigma = \{\sigma_1, \dots, \sigma_{N_e}\}$ спины электронов. Выражение $\rho(q, r, \sigma; \beta)$ для многочастичной матрицы плотности при низких температурах неизвестно, однако его можно получить из следующего операторного тождества $\exp(-\beta \hat{H}) \equiv \exp(-\Delta \beta \hat{H}) \dots \exp(-\Delta \beta \hat{H})$, в котором $\Delta \beta = \beta/(n+1)$, а $n+1$ — число сомножителей. В координатном представлении это тождество трансформируется в интеграл по траекториям:

$$\sum_{\sigma} \int_V dr^{(0)} \rho(q, r^{(0)}, \sigma; \beta) = \int_V dr^{(0)} \dots dr^{(n)} \rho^{(1)} \dots \rho^{(n)} \times \\ \times \sum_{\sigma} \sum_P (-1)^{\kappa_P} S(\sigma, \hat{P} \sigma') \hat{P} \rho_{r^{(n+1)}=r^{(0)}, \sigma'=\sigma}^{(n+1)}, \quad (3)$$

Физически формула (3) соответствует тому, что каждая квантовая частица (в данном случае электрон) представляется в виде набора $n+1$ точек, поэтому каждой конфигурации частиц соответствует вектор размерности $3 \sum_{i=1}^a N_i + 3N_e(n+1)$. Характерный размер облака точек для квантовой частицы порядка тепловой длины волны электрона $\lambda_e(\beta)$, $\lambda_e^2(\beta) = 2\pi \hbar^2 \beta / m_e$, а характерное расстояние между точками в облаке — порядка $\lambda_e(\Delta \beta)$.

Учет спина электронов осуществляется спиновой матрицей плотности (S), квантово-статистические эффекты учтены оператором перестановки \hat{P} , действующим на пространственные $r^{(n+1)}$ и спиновые σ' переменные электронов. Сумма в формуле (3) берется по всем перестановкам четности κ_P . Преобразование выраже-

ния (3) к виду, в котором сумма по всем перестановкам заменяется детерминантом обменной матрицы, позволяет обойти так называемую «проблему знаков» и повысить точность расчёта при высоких параметрах вырождения.

Так как формально каждый сомножитель $\rho^{(i)}$, $i = 1, \dots, n+1$ берется при «высокой» температуре $\Delta\beta$, то в качестве $\rho^{(i)}$ можно использовать высокотемпературную асимптотику матрицы плотности. Каждая такая многочастичная матрица плотности может быть, в свою очередь, представлена в виде произведения двухчастичных матриц плотности, для которых используется аналитическое решение уравнения Блоха в первом порядке теории возмущений, полученное Г. Кельбгом.

На рис. 3 приведены изотермы 40, 50, 100 и 200 кК водородно–гелиевой плазмы с массовой концентрацией гелия $Y = m_{\text{He}}/(m_{\text{He}} + m_{\text{H}}) = 0.234$. Из рисунков видно, что наблюдается хорошее согласие с химической моделью Саумона, Шабриэ и Ван Хорна для давления и удовлетворительное — для внутренней энергии. Для сравнения на рис. 3 также изображена изотерма $T = 100$ кК идеальной плазмы вырожденных электронов и классических протонов и α -частиц. Эта изотерма приближается к рассчитанной по химической модели при низких и высоких плотностях, а в области образования связанных состояний давление и энергия идеальной плазмы больше, чем неидеальной. Как в методе МКИТ, так и в химической модели плазмы на зависимостях энергии неидеальной плазмы от концентрации электронов на изотермах имеются минимумы, связанные с образованием атомов.

Результаты четвёртой главы опубликованы в работах [4–8; 23; 25].

В пятой главе приведено описание методов функционала плотности и квантовой молекулярной динамики, рассмотрены пределы применимости псевдопотенциалов и выполнены расчёты кривых плавления для нескольких металлов, в том числе для возбуждённой электронной подсистемы.

Метод функционала плотности (МФП) рассматривает систему взаимодействующих частиц во внешнем потенциале $V_{ext}(\mathbf{r})$. Главенствующую роль электронной плотности $n(\mathbf{r})$ при построении общей теории многоэлектронных систем выявили Хоэнберг и Кон в 1964 году в виде двух утверждений. В дальнейшем эти утверждения были сформулированы в виде теорем, доказательства которых приводятся во многих изложениях МФП. Согласно теории МФП, можно ввести универсальный функционал энергии $E_{\text{HK}}[n]$, минимизация которого при условии нормировки на заданное число частиц $\int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N$ определяет основное состояние системы.

Теория Хоэнберга и Кона обладает рядом недостатков как формального, так и практического характера. Строгое математическое обоснование МФП было дано

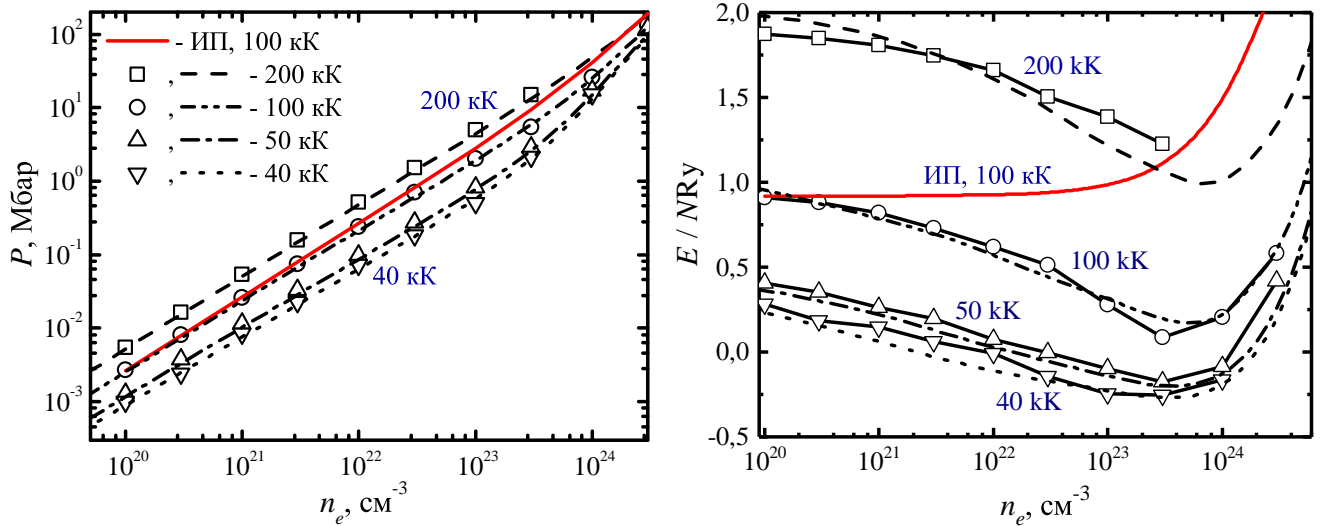


Рис. 3. **Слева:** давление водородно–гелиевой плазмы с массовой концентрацией гелия $Y = 0.234$ на изотермах в зависимости от концентрации электронов. МКИТ: \square — 200 кК, \circ — 100 кК, \triangle — 50 кК, ∇ — 40 кК. Идеальная плазма: ———— 100 кК. Химическая модель плазмы: - - - - - 200 кК, - - - - - 100 кК, - - - - - 50 кК, 40 кК. **Справа:** внутренняя энергия на частицу в Ry на изотермах водородно–гелиевой плазмы с массовой концентрацией гелия $Y = 0.234$ в зависимости от концентрации электронов.

в работах Леви и Либа. Для практических расчётов с использованием МФП делается упрощающее предположение: система взаимодействующих частиц заменяется на систему, в которой электроны не взаимодействуют, в некотором эффективном потенциале. Предполагается, что плотность основного состояния у этих двух систем будет одинакова. Важно отметить, что первое из этих предположений не имеет математического обоснования, а его разумность проверяется в многочисленных практических расчётах. В построенный таким образом функционал энергии $E_{KS}[n]$ входит кинетическая энергия невзаимодействующих электронов, а также дополнительный член $E_{xc}[n]$, имеющий название обменно-корреляционной энергии. Минимизация функционала $E_{KS}[n]$ по одночастичным волновым функциям при условии их ортонормированности приводит к уравнениям Кона–Шэма, имеющим вид одночастичного уравнения Шредингера с локальным потенциалом. Для решения уравнений Кона–Шэма традиционно используется разложение одноэлектронных волновых функций по базисным функциям; в настоящее время наиболее популярным является использование базиса плоских волн.

Для моделирования конденсированных систем с вырожденными электронами был разработан метод квантовой молекулярной динамики (КМД). Этот метод основан на приближении Борна–Оппенгеймера, в котором, в силу большого различия в массах электронов и ионов, считается, что распределение электронной плотно-

сти мгновенно подстраивается под текущее расположение ионов. Таким образом, в методе КМД рассматривается лишь классическая динамика ионов, а распределение электронной плотности рассчитывается МФП при неподвижных ионах. Обычно в методе КМД рассматривают кубическую вычислительную ячейку с блоховскими граничными условиями. В ячейку помещаются атомы, далее рассчитывается распределение электронной плотности, по теореме Фейнмана-Гельмана вычисляются силы, действующие на ионы, ионы смещаются в новые положения в соответствии со вторым законом Ньютона и заданным временным шагом, а затем цикл повторяется. Для поддержания заданной температуры ионов применяется термостат, температура электронов фигурирует в распределении Ферми–Дирака, которое определяет числа заполнения.

Для ускорения расчётов и улучшения сходимости в МФП активно используются псевдоорбитали и псевдопотенциалы. Идея псевдопотенциалов и псевдоорбиталей состоит в регуляризации функций, описывающих потенциал и волновые функции, вблизи ядра. В частности, сильно осциллирующие вблизи ядра волновые функции заменяются монотонными зависимостями внутри сферы вокруг ядра радиуса r_c , а самосогласованный потенциал принимает конечное значение в точке нахождения ядра. Существуют различные типы псевдопотенциалов: сохраняющие норму, ультрамягкие, проекционно-присоединенных волн и другие. Принципы построения псевдопотенциалов отличаются, однако основная идея остается неизменной: уравнения Кона–Шэма необходимо решать только для некоторого числа внешних (валентных) электронов, а электроны кора описываются «замороженными» регуляризованными псевдоорбиталями и псевдопотенциалами. Псевдопотенциалы могут вносить ошибки в расчёты при высоких давлениях и температурах, что подтверждается сравнительным моделированием полноэлектронным и псевдопотенциальным МФП. Для вычислений использовались два программных кода: FP-LMTO, в котором уравнения Кона–Шэма решаются для всех электронов, и VASP, в котором реализовано псевдопотенциальное приближение. Были рассчитаны давление электронов на холодных кривых, а также давление и теплоёмкость при постоянном объёме на изохорах нормальной плотности. На рис. 4 показана теплоёмкость при постоянном объёме (слева) и тепловое давление электронов (справа) в оцк-кристалле вольфрама в зависимости от температуры на изохоре нормальной плотности.

При температурах выше ~ 3 эВ происходит возбуждение f-электронов кора атомов вольфрама, поэтому в полноэлектронном расчёте заметен резкий рост теплоёмкости. Так как f-электроны отсутствуют в псевдопотенциале вольфрама

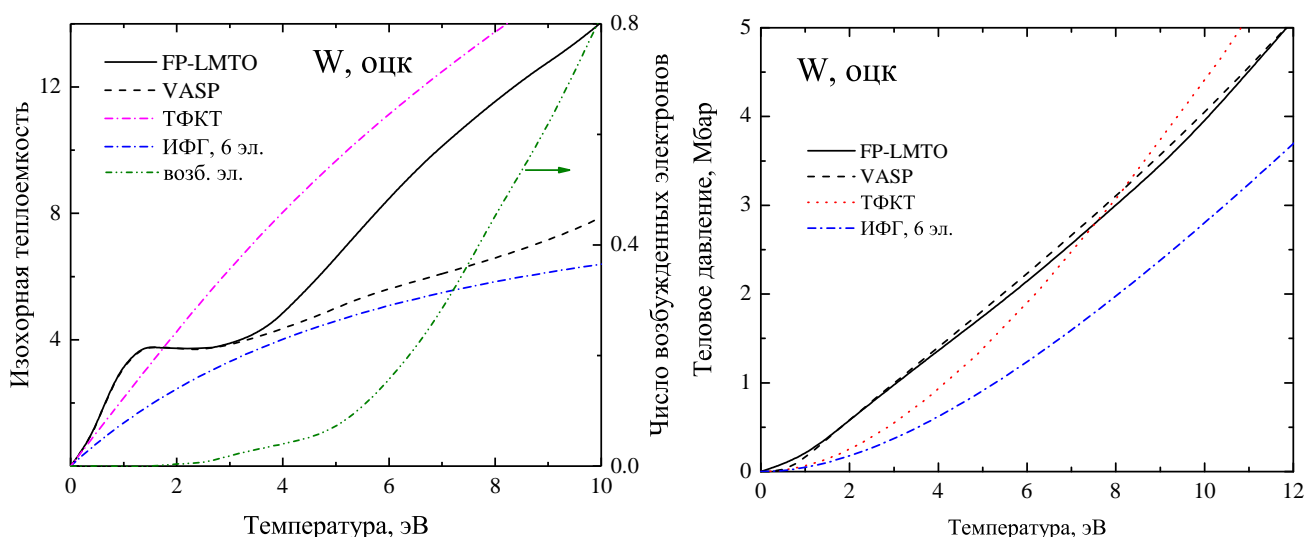


Рис. 4. **Слева:** электронная теплоемкость в оцк-кристалле W на изохоре нормальной плотности в зависимости от температуры электронов. **Справа:** тепловое давление в оцк-кристалле вольфрама в зависимости от температуры на изохоре нормальной плотности. — — FP-LMTO, - - - - VASP, — TФКТ, - · - · - идеальний ферми-газ с шестью электронами. Правая ось на левом рисунке: - · - · - — число возбуждённых электронов кора по модели FP-LMTO.

(валентными считаются только электроны $5d$ и $6s$ -оболочек), в расчёте с помощью кода VASP электронная теплоемкость растет значительно медленнее по сравнению с полноэлектронным подходом. Для вольфрама ширина запрещенной зоны между состояниями кора и дном валентной зоны составляет ≈ 24 эВ, поэтому возбуждение электронов кора начинается при температуре около 3 эВ. Метод TФКТ показывает монотонное поведение теплоемкости и неплохо согласуется с FP-LMTO, «сглаживая» осцилляции. Следует также отметить, что начальный наклон зависимости электронной теплоемкости от температуры для вольфрама, полученный МФП, значительно больше, чем для модели идеального ферми-газа с шестью валентными электронами. По этой причине в полуэмпирических уравнениях состояния вольфрама обычно используют экспериментальное значение коэффициента электронной теплоемкости, а не теоретическое.

Для расчёта кривых плавления Al, Cu и Ni использовался МФП для электронов, квазигармоническое приближение (КГП) для ионов и критерий Линдемана. Согласно этому критерию, плавление наступает, когда среднеквадратическое значение амплитуды колебаний превышает некоторую пороговую величину. Для вычислений использовались программные коды VASP для МФП и Phonopy для КГП; для всех металлов расчёты проводились в гцк-суперячейке с 32 атомами. С помощью КГП вычислялась плотность состояний фононов $g(\omega)$ в кристалле, через которую, путём усреднения, выражается среднеквадратичное смещение атомов от

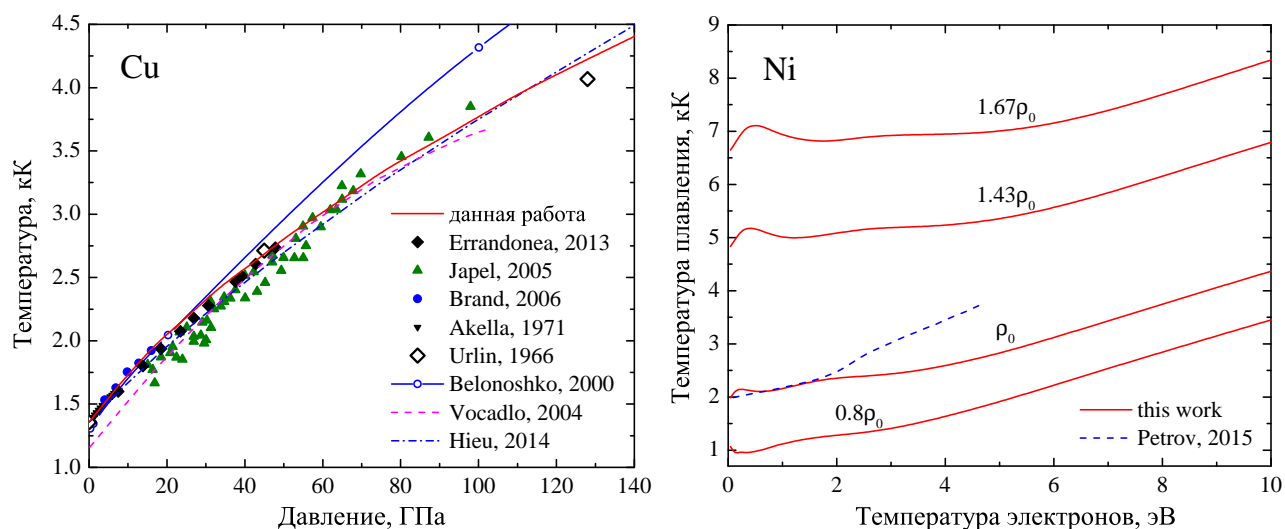


Рис. 5. **Слева:** Кривая плавления меди на диаграмме температура — давление. Моделирование: — — — — данная работа; - - - - - первопринципное моделирование; —○— — классическая молекулярная динамика; - - - - - метод статистических моментов. Лазерно-подогреваемые алмазные наковальни: ◆, ▲, ●. Полость высокого давления: ▼. Плавление в ударной волне: ◇. **Справа:** Зависимость температуры плавления Ni при $\rho = 0.8\rho_0$, ρ_0 , $1.43\rho_0$ и $1.67\rho_0$ от электронной температуры. — — — — данная работа, - - - - - оценка температуры плавления через температуру Дебая.

положения равновесия. Для определения порогового среднеквадратичного смещения использовалась экспериментальная температура плавления при атмосферном давлении. Это не является принципиальным ограничением используемого подхода, так как нормальную температуру плавления можно с хорошей точностью получить из первопринципного расчета.

На рис. 5 (слева) показана зависимость температуры плавления Cu от давления. В расчётах температура электронов принималась равной температуре ионов. Полученная в рамках МФП и КГП кривая находится в хорошем согласии с измерениями в полости высокого давления и в подогреваемых алмазных наковальнях. Следует также отдельно упомянуть первопринципные результаты и особенно метод статистических моментов, которые очень близки к кривой данной работы. С другой стороны, метод классической молекулярной динамики предсказывает существенно более высокие температуры плавления при $P > 30$ ГПа.

В экспериментах по фемтосекундному лазерному нагреву металлов возникают экзотические состояния, в которых кристаллическая решетка остается относительно холодной, а электроны приобретают довольно высокую температуру. Свойства таких состояний активно исследуются последние два десятилетия. Различные температуры электронов и решётки могут существенно влиять на термодинамические и транспортные свойства металлов. Расчеты зависимости кривых

плавления Al, Cu и Ni от электронной температуры в рамках КГП и обобщенного критерия Линдемана проводились при различных плотностях: нормальной, ниже и выше нормальной. Нормальная плотность ρ_0 бралась при температуре 293 К из расчёта в КГП. Наблюдается немонотонное поведение температуры плавления в зависимости от электронной температуры для всех исследованных металлов, при этом кривые для сжатых кристаллов существенно различаются. Так, для Al при $\rho > \rho_0$ имеется выраженный минимум на температуре плавления, который движется в сторону более высоких электронных температур с увеличением степени сжатия. На кривых температуры плавления для Ni, рис. 5 (справа), наблюдается локальный максимум при $\rho \geq \rho_0$ и $T_e < 0.5$ эВ даже при нормальной плотности; при $T_e = 4 \div 10$ эВ температура плавления Ni существенно возрастает.

Результаты пятой главы опубликованы в работах [10–12].

В шестой главе приведены результаты моделирования ударно–волновых экспериментов методом квантовой молекулярной динамики для алюминия, дейтерия и LiD.

Теоретическое описание ударно–волновых экспериментов в конденсированном веществе остаётся серьёзной проблемой с момента появления первых публикаций более 60 лет назад. Вообще говоря, для этого требуется решить квантовую многочастичную задачу для электронной подсистемы. Эту проблему можно упростить для кристаллического состояния, обладающего трансляционной симметрией, так что достаточно рассмотреть только элементарную ячейку. Однако в разупорядоченном состоянии (жидкости или плотной плазмы) не существует очевидных путей для упрощения. Таким образом, для интерпретации ударно–волновых экспериментов требуется прямое численное моделирование системы с достаточно большим числом частиц.

Существуют различные типы ударно–волновых экспериментов: по ударной сжимаемости сплошных и пористых образцов, по изоэнтропическому расширению, по двукратному и многократному (квазиизоэнтропическому) ударному сжатию, по измерению температуры и скорости звука за фронтом ударной волны и некоторые другие. В данной главе демонстрируется, что все эти типы экспериментов могут быть с хорошей точностью описаны с помощью метода КМД.

Наиболее полная теоретическая интерпретация ударно–волновых экспериментов была выполнена для алюминия. Моделирование методом КМД проводилось для 108 атомов, помещённых в кубическую суперячейку с периодическими граничными условиями и расположенных в начальный момент времени в узлах идеальной гцк-решётки. Плотность вещества определялась параметром решётки

и оставалась постоянной в процессе вычислений. Классическая динамика ионов алюминия изучалась в течение не менее 1 пс, шаг по времени выбирался равным 2 фс. При низких температурах и плотностях время моделирования увеличивалось до 8 пс для достижения термодинамического равновесия. Температура ионной подсистемы поддерживалась на заданном уровне с помощью термостата Нозе–Гувера, такая же температура устанавливалась для электронной подсистемы в распределении Ферми–Дирака. Для расчёта зонной структуры использовалась одна точка (Γ -точка) в зоне Бриллюэна. Энергия плоских волн не превышала 218 эВ. Термодинамические параметры системы находились путём усреднения соответствующих значений на равновесном участке моделирования, статистическая ошибка не превышала 1%. К полученным значениям давления и энергии прибавлялись кинетическое давление и энергия ионов, соответственно.

Все расчёты выполнялись с ультрамягким псевдопотенциалом для алюминия с тремя валентными электронами в диапазоне температур 0.3–70 кК и плотностей 1—7.3 г/см³. При более высоких температурах начинается возбуждение электронов кора, что приводит к занижению электронной теплоёмкости. Поэтому при $T \gtrsim 8$ эВ необходимо использовать псевдопотенциал с большим числом валентных электронов. Для изучения влияния входных параметров на результаты проводились специальные расчёты с большей максимальной энергией плоских волн, большим числом атомов и k -точек в зоне Бриллюэна, различными псевдопотенциалами и обменно–корреляционными функционалами. Наибольшее влияние на результаты оказывает выбор обменно–корреляционного функционала. Приближение локальной плотности (LDA) даёт меньшее давление и энергию, чем обобщённо-градиентное приближение (GGA). Псевдопотенциал PBE даёт энергию до 3% больше, а давление до 3% меньше, чем ультрамягкий псевдопотенциал. Использование 256 частиц вместо 108, максимальной энергии плоских волн 598 эВ вместо 218 эВ, сетки k -точек в зоне Бриллюэна $4 \times 4 \times 4$ вместо одной Γ -точки оказывает незначительное влияние на результаты.

Ударные адиабаты как для сплошных, так и для пористых образцов алюминия рассчитывались с помощью численного решения уравнения Гюгонио. Для пористых образцов использовалась так называемая модель Ферми–Зельдовича. Скорость ударной волны и массовая скорость за её фронтом вычислялись с помощью законов сохранения массы и импульса. Для ударных адиабат двукратного сжатия также численно решалось уравнение Гюгонио, в котором в качестве начальной точки использовалось состояние на основной ударной адиабате. Для построения изоэнтроп разгрузки использовался метод глобальной реконструкции. Для этой

цели вычислялись интерполяционные функции $E(T, V)$ и $P(T, V)$ по результатам КМД-моделирования на сетке изотерм и изохор с использованием бикубических сплайнов. Далее, в рамках модели Ферми–Зельдовича, решалось обыкновенное дифференциальное уравнение для температуры:

$$\left(\frac{dT}{dV}\right)_S = -T \left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_V \quad (4)$$

с начальным условием на ударной адиабате $T(V_H) = T_H$, где удельный объем V_H и температура T_H на ударной адиабате брались из КМД-расчета. Массовая скорость вдоль изоэнтропы вычислялась с помощью инварианта Римана. Изоэнтропическая скорость звука за фронтом ударной волны $(\partial P/\partial \rho)_S$ вычислялась как производная вдоль изоэнтропы в начальной точке на ударной адиабате на плоскости давление–плотность.

Ударные адиабаты сплошных и пористых образцов Al, вычисленные методом КМД, представлены на рис. 6 (слева в координатах давление–степень сжатия, справа в координатах волновая скорость–массовая скорость), в сравнении с экспериментальными данными и многофазным полуэмпирическим широкодиапазонным уравнением состояния (МФУРС) И. В. Ломоносова. Видно хорошее согласие рассчитанной основной ударной адиабаты с экспериментальными данными, следует отметить отличное согласие с опытом Сандийских национальных лабораторий, который, по утверждению авторов, обладает наибольшей точностью в исследованном диапазоне давлений. Также результаты КМД-моделирования очень близки к более ранним расчётам М. Дежарли. Таким образом, в согласии с более ранними работами, КМД-расчёты не подтверждают влияния полиморфного перехода из гцк в гпу структуру на ударную адиабату алюминия.

Область более низких по сравнению с основной ударной адиабатой плотностей исследовалась методом ударного сжатия пористых образцов (пористость $m = \rho_{00}/\rho_0 = 2, 3$ и 8 , ρ_{00} — плотность пористого образца). Согласие с экспериментальными данными при давлении выше 10 ГПа весьма хорошее, однако наблюдаются некоторые различия при низких давлениях, особенно для экспериментов с образцами высокой пористости ($m = 8$). Легко видеть, что начальная точка на экспериментальной ударной адиабате высокопористого образца ($m = 8$) соответствует плотности ниже нормальной; это является указанием на тот факт, что при относительно низких давлениях необходимо привлекать модели кинетики схлопывания пор.

Изоэнтропическое расширение Al после сжатия в ударной волне исследо-

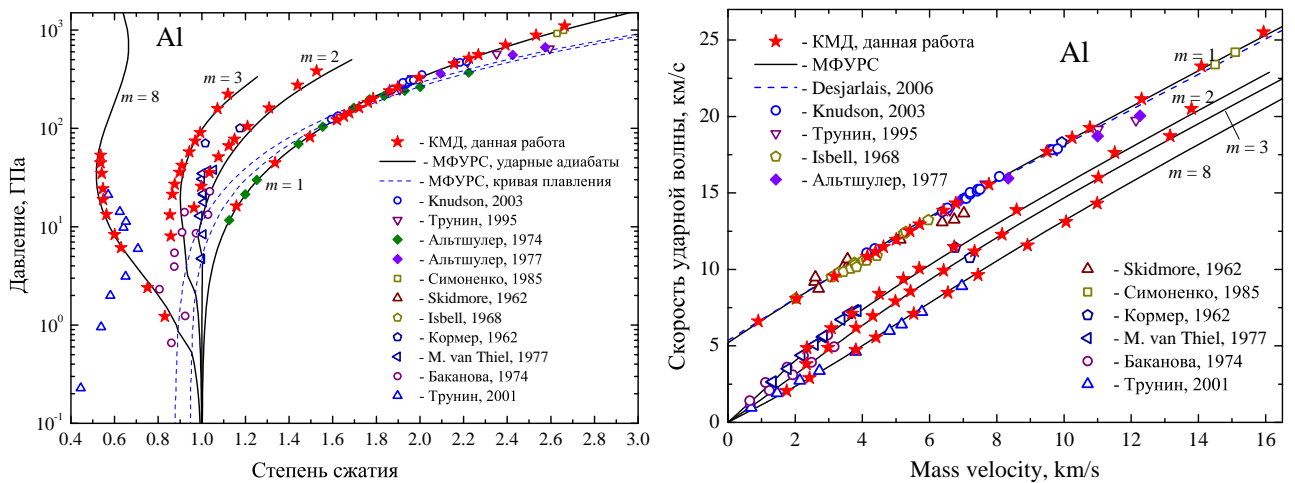


Рис. 6. **Слева:** ударные адиабаты сплошных и пористых образцов Al на диаграмме давление – степень сжатия, m — пористость. Ударные адиабаты: — — МФУРС, ★ — КМД. Кривая плавления: - - - - — МФУРС. Значки — экспериментальные данные. **Справа:** ударные адиабаты сплошных и пористых образцов Al в координатах волновая скорость – массовая скорость, где m — пористость. — — МФУРС, ☆ — КМД, - - - - — расчёт методом КМД М. Дежарли. Значки — экспериментальные данные.

валось экспериментально многими авторами. Более ранние эксперименты проводились при относительно низких давлениях ударного сжатия, а Al расширялся непосредственно в воздух. На рис. 7 (слева) показаны изоэнтропы разгрузки Al, рассчитанные методом КМД и по МФУРС совместно с экспериментальными данными М. В. Жерноклетова с сотрудниками. Начальные точки всех изоэнтроп находятся в твердой фазе, наблюдается хорошее согласие между обеими моделями и измерениями. Следует отметить, что МФУРС предсказывает конечные точки всех изоэнтроп на рис. 7 в твёрдой фазе или в области плавления. При расширении алюминия из состояний с более высокими давлениями ударного сжатия наблюдается систематическое занижение результатов КМД-моделирования по сравнению с экспериментальными данными Б. Л. Глушака с сотрудниками, при этом обеспечивается хорошее согласие с МФУРС. Следует отметить, что на сегодняшний день не существует уравнения состояния, которое смогло бы описать экспериментальные точки со скоростью расширения в воздух свыше 13 км/с.

Были также выполнены расчёты изоэнтропической скорости звука на основной ударной адиабате. Использовались те же интерполяционные функции $E(V, T)$ и $P(V, T)$ для вычисления производной $dP/d\rho$ вдоль изоэнтропы в начальной точке на ударной адиабате. Результаты представлены на рис. 7 (справа). Наклон полученной кривой близок результатам, полученным по МФУРС, а согласие с доступными экспериментальными данными хорошее. Немонотонное поведение объясняется ошибками интерполяции в области вблизи плавления.

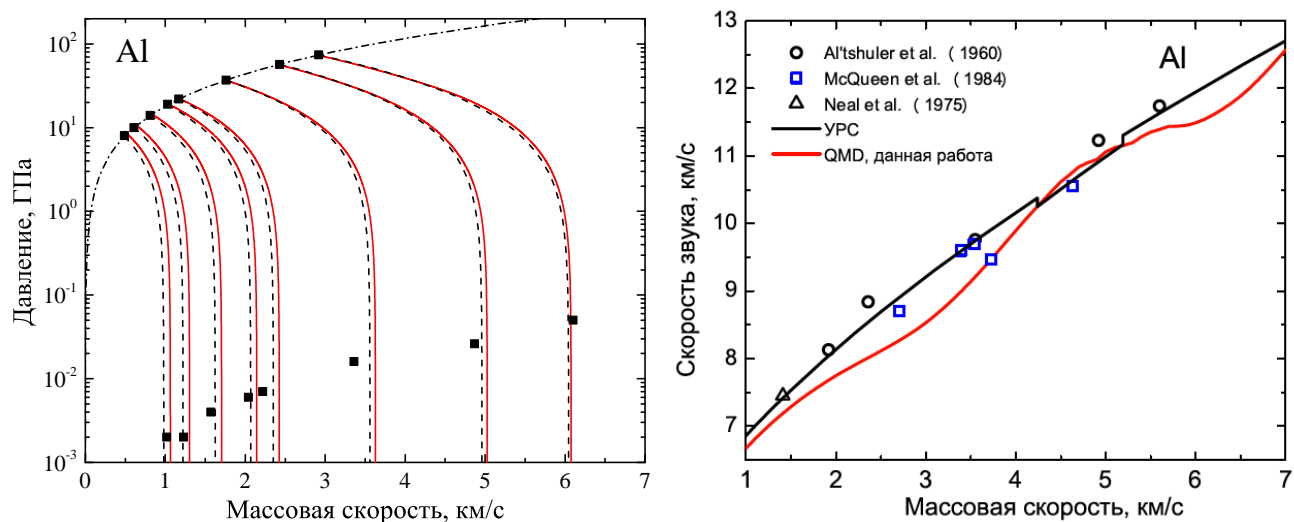


Рис. 7. **Слева:** изоэнтропы разгрузки Al, начальные точки соответствуют эксперименту М. В. Жерноклетова с сотрудниками. — КМД, - - - - - МФУРС, ■ — экспериментальные данные, - - - - - — основная ударная адиабата по МФУРС. **Справа:** скорость звука вдоль основной ударной адиабаты Al. — МФУРС, — КМД, ○, □, △ — экспериментальные данные.

Изучение дейтерия в ударных волнах вызвано как фундаментальным интересом, так и прикладными вопросами. Одной из наиболее обсуждаемых проблем является возможное существование плазменного или диссоциативного фазового перехода в водородоподобных системах. В 2007 году в работе В. Е. Фортова с сотрудниками были опубликованы уникальные измерения квазиизоэнтропического сжатия дейтерия, в которых был обнаружен скачок плотности примерно на 20% при давлении $P \approx 130$ ГПа. Привлечение первопринципных подходов для интерпретации этих данных может прояснить необычное поведение квазиизоэнтропы и предоставить дополнительную информацию о свойствах дейтерия в этой области фазовой диаграммы.

Методом КМД было проведено моделирование 64 атомов дейтерия в суперячейке с периодическими граничными условиями. В начальный момент атомы располагались в узлах гцк-решётки, сгруппированные попарно. Температура ионов контролировалась термостатом Нозе–Гувера и задавалась в пределах 6500–21000 К. Плотность системы определялась размером суперячейки и выбиралась в пределах 0.9–4.3 г/см³. Система уравнивалась в течение 1000 шагов в режиме выхода на равновесие ($E_{\text{cut}} = 250$ эВ, давление не вычислялось), а в течение следующих 1000 шагов термодинамические параметры усреднялись в рабочем режиме ($E_{\text{cut}} = 1200$ эВ). Шаг по времени при моделировании составлял 0.2 фс.

Изоэнтропа сжатия дейтерия реконструировалась методом Ферми–Зельдовича путём решения обыкновенного дифференциального уравнения (4) на сетке

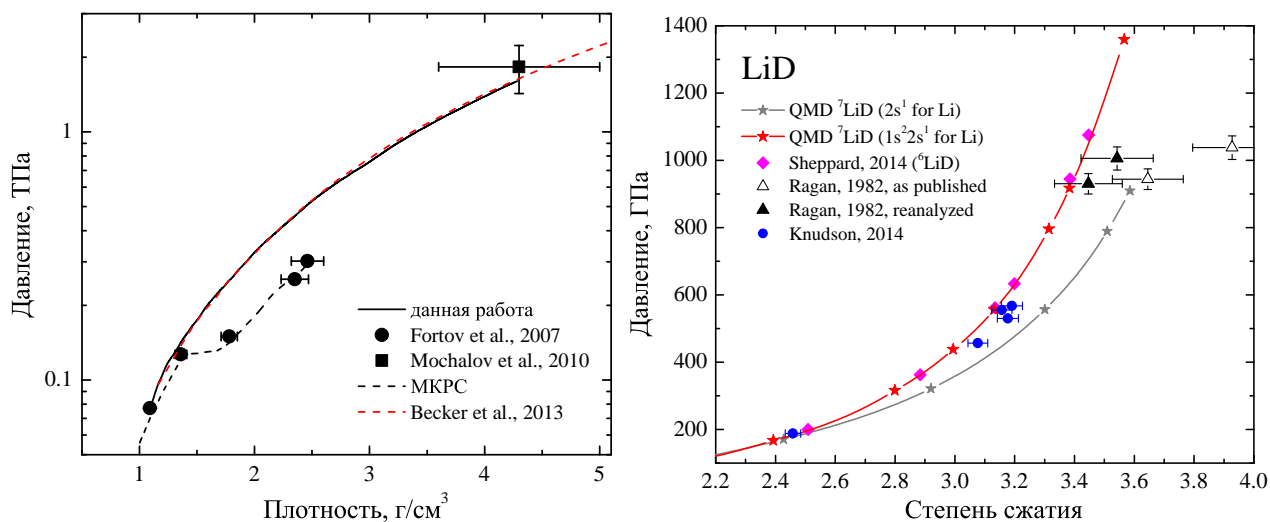


Рис. 8. Слева: изоэнтропа сжатия дейтерия. — — КМД-моделирование данной работы, ● — экспериментальные данные В. Е. Фортова с сотрудниками (2007), ■ — экспериментальная точка М. А. Мочалова с сотрудниками (2010), - - - - метод МКРС, - - - - КМД-моделирование А. Беккера с сотрудниками (2013). Справа: ударная адиабата LiD при высоких давлениях в диапазоне степеней сжатия от 2.2 до 4.0. КМД: —★— — одноэлектронный псевдопотенциал для Li, —★— — полноэлектронный псевдопотенциал. ● — экспериментальные данные Сандийских национальных лабораторий, Δ, ▲ — оригинальные и скорректированные экспериментальные данные, полученные в подземных ядерных взрывах. ◆ — КМД расчёты ${}^6\text{LiD}$ ($\rho_0 = 0.8 \text{ г/см}^3$) других авторов.

изотерм и изохор. В качестве начального условия была выбрана экспериментальная точка из работы В. Е. Фортова с сотрудниками при плотности $\rho_0 = 1.09 \text{ г/см}^3$ и давлении $P_0 = 77 \text{ ГПа}$. Температура T_0 в этой точке подбиралась методом КМД так, чтобы получить давление P_0 , $T_0 = 7.6 \text{ кК}$. Эта температура более, чем в два раза выше, чем предсказывают другие модели. На рис. 8 (слева) показана расчетная изоэнтропа сжатия дейтерия вместе с экспериментальными данными из работ В. Е. Фортова и М. А. Мочалова с сотрудниками. Видно, что на кривой, вычисленной методом КМД, нет скачка плотности вплоть до давлений 2 ТПа. Выполненные позже расчеты А. Беккера с сотрудниками методом КМД с 256 частицами полностью подтвердили этот вывод, при этом температура в начальной точке для расчета изоэнтропы получилась немного ниже (6.9 кК). С другой стороны, классический метод Монте–Карло для реагирующих смесей (МКРС) согласуется с экспериментальными данными. Причина такого согласия, по-видимому, состоит в том, что метод МКРС не учитывает ионизацию, которая существенно влияет на термодинамические свойства дейтерия.

Влияние псевдопотенциалов на результаты расчета термодинамических параметров в методе КМД изучалось на примере дейтерида лития. Для LiD существует

обширный массив ударно–волновых данных, в том числе по измерениям температуры за фронтом ударной волны. Электронная структура LiD достаточно проста (только s-электроны при нормальных условиях), а среднее число электронов на атом относительно низкое. Для Li существуют псевдопотенциалы, учитывающие 1 или 3 валентных электрона. Для моделирования ударной адиабаты использовался МФП и метод КМД в рамках пакета программ VASP. Все расчёты проводились с псевдопотенциалами PAW, в качестве обменно–корреляционного функционала использовалось обобщенно–градиентное приближение с коррекциями (PBE). Использовалась кубическая суперячейка со 108 атомами Li и 108 атомами D. Во всех расчётах использовалась одна Γ -точка в зоне Бриллюэна. Шаг по времени варьировался от 2 фс для моделирования при низкой температуре до 0.2 фс при высокой температуре для точного интегрирования уравнений движения ионов между столкновениями. Полное время моделирования достигало 3–5 пс для достижения статистической ошибки по давлению и энергии менее 1%.

На рис. 8 (справа) показана основная ударная адиабата LiD при давлениях выше 200 ГПа, вычисленная с двумя псевдопотенциалами для Li. Как видно из рисунка, различия между ударными адиабатами LiD, полученными с псевдопотенциалами для Li с одним и тремя валентными электронами, являются существенными и превышают экспериментальную погрешность для некоторых работ. Одноэлектронный псевдопотенциал для Li даёт более пологую ударную адиабату при высоких плотностях. При этом данные температурных измерений за фронтом ударной волны хорошо описываются обеими псевдопотенциалами. Различия в давлении для двух псевдопотенциалов требуют специального анализа и объясняются следующим образом. При классическом молекулярно–динамическом моделировании ионы лития могут подходить достаточно близко друг к другу, и это минимальное расстояние тем меньше, чем выше температура. При таком сближении коры псевдопотенциалов могут перекрываться. Так как внутри кора потенциал отличается от реального, этот эффект создает дополнительное нефизическое притяжение между атомами лития в случае использования одноэлектронного псевдопотенциала. Этот вывод подтверждается анализом парных корреляционных функций для атомов лития. Таким образом, метод КМД накладывает дополнительные ограничения на использование псевдопотенциалов, помимо ограничений, выявленных при моделировании МФП в главе 5.

Результаты шестой главы опубликованы в работах [13–16].

В седьмой главе обсуждается метод расчета транспортных свойств жидких металлов и плотной плазмы на основе метода КМД и формулы Кубо–Гринвуда.

Транспортные и оптические свойства веществ в области жидкости и плотной плазмы необходимы для многих фундаментальных и прикладных задач, в частности, при воздействии мощных лазерных импульсов на вещество, при пропускании мощных импульсов тока через проводники, при исследовании перехода металл–диэлектрик и других. Первопринципные расчёты транспортных и оптических свойств, основанные на методе КМД и формуле Кубо–Гринвуда, сегодня нашли широкое применение.

Первопринципный расчёт транспортных и оптических свойств состоит из трёх этапов: КМД-моделирование, вычисление зонной структуры и вычисление транспортных и оптических свойств с помощью формулы Кубо–Гринвуда.

В начальный момент времени атомы помещаются в суперячейку с блоховскими граничными условиями. Затем выполняется КМД-моделирование при заданной плотности и температуре, описанное в главе 5, и определяются траектории ионов. Независимые ионные конфигурации, по которым затем производится усреднение, выбираются на равновесном участке КМД-моделирования.

Вычисление зонной структуры выбранных ионных конфигураций производится с помощью МФП, при этом используются технические параметры, которые обеспечивают более высокую точность расчёта, чем на первом этапе. Полученные волновые функции затем привлекаются для вычисления матричных элементов оператора скорости.

Комплексная динамическая электропроводность $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$ является коэффициентом пропорциональности между плотностью тока \mathbf{j}_ω и приложенным электрическим полем \mathbf{E}_ω частоты ω :

$$\mathbf{j}_\omega = (\sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega))\mathbf{E}_\omega. \quad (5)$$

Действительная часть динамической электропроводности $\sigma_1(\omega)$ связана с энергией, поглощенной электронами. Она вычисляется с помощью формулы Кубо–Гринвуда с использованием матричных элементов, собственных значений энергии $\epsilon_{i,\mathbf{k}}$ и ферми–весов $f(\epsilon_{i,\mathbf{k}})$, полученных при вычислении зонной структуры:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^2}{3m^2 \omega \Omega} \sum_{i,j,\alpha,\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) |\langle \Psi_{i,\mathbf{k}} | \nabla_\alpha | \Psi_{j,\mathbf{k}} \rangle|^2 \times \\ \times [f(\epsilon_{i,\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{j,\mathbf{k}})] \delta(\epsilon_{j,\mathbf{k}} - \epsilon_{i,\mathbf{k}} - \hbar\omega). \quad (6)$$

Здесь сумма берётся по всем \mathbf{k} -точкам в зоне Бриллюэна (суммирование по \mathbf{k}), по всем зонам, участвующим в расчёте (по i и j), по трём пространственным

координатам (по α); $W(\mathbf{k})$ — весовой коэффициент конкретной \mathbf{k} -точки в зоне Бриллюэна. Для практических расчётов δ -функция заменяется функцией Гаусса с некоторой шириной, являющейся параметром расчёта.

Значения динамической электропроводности для каждой ионной конфигурации усредняются. Мнимая часть динамической электропроводности восстанавливается с помощью преобразования Крамерса–Кронига. Если действительная и мнимая части динамической электропроводности известны, можно также вычислить и оптические свойства.

Коэффициент теплопроводности выражается через коэффициенты Онзагера \mathcal{L}_{mn} :

$$K = \frac{1}{e^2 T} \left(\mathcal{L}_{22} - \frac{\mathcal{L}_{12} \mathcal{L}_{21}}{\mathcal{L}_{11}} \right). \quad (7)$$

При относительно низких температурах второй член в правой части выражения (7) (обычно называемый термоэлектрическим) даёт пренебрежимо малый вклад в коэффициент теплопроводности, поэтому его часто отбрасывают.

Динамические коэффициенты Онзагера $\mathcal{L}_{mn}(\omega)$ вычисляются с помощью формулы Кубо–Гринвуда, аналогичной (6). Значения коэффициентов Онзагера, полученные для различных ионных конфигураций, усредняются. Статические коэффициенты Онзагера вычисляются путём экстраполяции к нулевой частоте.

Для верификации методики и изучения зависимости от технических параметров проводились расчеты статической электропроводности жидкого алюминия при нормальном давлении в диапазоне температур от 973 К до 1473 К. Результаты моделирования и справочные данные показаны на рис. 9 (слева).

Отличие между рассчитанными значениями и справочными данными составляет $\sim 25\%$. Факторы, увеличивающие значение электропроводности, дают полную ошибку $+22\%$. Факторы, уменьшающие значение электропроводности, дают ошибку -9% . Детальное выяснение причин этих ошибок затруднено, так как для этого требуются очень большие вычислительные ресурсы. Тем не менее, наклон зависимости электропроводности от температуры близок к наклону справочной кривой.

Статическая электропроводность наиболее сильно зависит от числа атомов. Результаты для меньшего числа атомов — 108 — также показаны на рис. 9 (слева), различие со справочными данными около 12% . Доскональное исследование сходимости статической электропроводности для алюминия при $T = 1273$ К и $\rho = 2.249$ г/см³ показало, что сходимость достигается при числе частиц 256 и сетке \mathbf{k} -точек $5 \times 5 \times 5$; полученное значение показано звёздочкой на рис. 9 (слева).

Углеродородные пластики широко используются в качестве абляторов в экс-

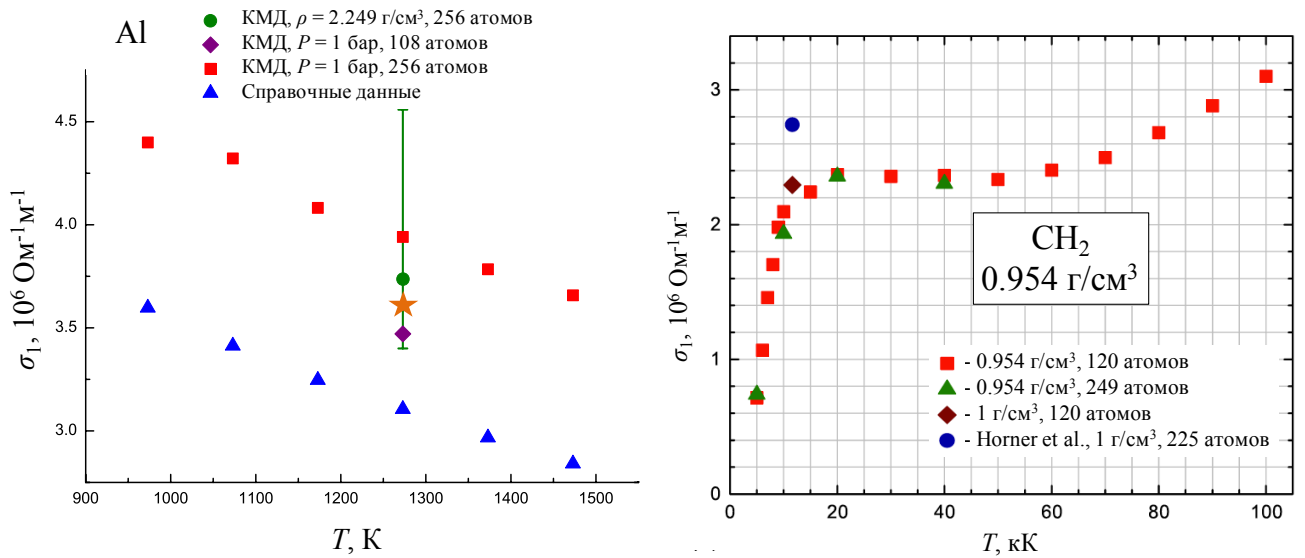


Рис. 9. **Слева:** сравнение вычисленной статической электропроводности на нормальной изобаре со справочными данными. КМД при $T = 1273 \text{ К}$, $\rho = 2.249 \text{ г/см}^3$: ● — 256 атомов, Γ -точка; ★ — 256 атомов, сетка k -точек $5 \times 5 \times 5$, достигнута сходимость; ◆ — КМД-моделирование со 108 атомами; ■ — КМД-моделирование нормальной изобары, 256 атомов; ▲ — справочные данные. **Справа:** температурная зависимость статической электропроводности плазмы эффективного состава CH_2 . ■ — $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$, 120 атомов; ▲ — $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$, 249 атомов; ◆ — $\rho = 1 \text{ г/см}^3$, 120 атомов; ● — $\rho = 1 \text{ г/см}^3$, $T = 1 \text{ эВ}$, КМД-моделирование других авторов.

периментах по воздействию мощных лазерных импульсов на вещество, в частности, в инерциальном термоядерном синтезе и при ударно-волновых исследованиях. В подобных экспериментах возникает плотная плазма с различными концентрациями углерода и водорода, транспортные свойства которой плохо изучены. По этой причине были проведены исследования плазмы эффективного состава CH_2 , которая получается при нагреве полиэтилена или полиметилпентена.

При КМД-моделировании использовался обменно-корреляционный функционал LDA и псевдопотенциалы PAW с четырьмя валентными электронами для углерода и одним валентным электроном для водорода. При самой высокой температуре моделирования 100 кК проводились также расчёты с 6-электронным псевдопотенциалом для углерода без заметного влияния на результаты. Максимальная энергия плоских волн выбиралась равной 300 эВ, использовалась одна k -точка (Γ -точка) в зоне Бриллюэна. Число зон в расчётах увеличивалось с ростом температуры для учёта эффекта возбуждения электронов. Зоны с числами заполнения меньше, чем 5×10^{-6} считались незаполненными. Большинство расчётов было проведено для 120 атомов (40 атомов углерода и 80 атомов водорода), распределенных однородно внутри кубической вычислительной ячейки. Шаг по времени выбирался равным 0.2 фс, как и на этапе приведения моделируемой систе-

мы в термодинамическое равновесие. Столь малый шаг по времени объясняется тем, что в моделировании участвуют легкие частицы (водород). Конфигурации с номерами от 2500 до 12500 (0.5 и 2.5 пс, соответственно) считались равновесными; на равновесном участке выбирались 15 ионных конфигураций для усреднения. Динамические коэффициенты Онзагера вычислялись для частот от 0.005 эВ до 40 эВ с шагом по частоте 0.005 эВ. Уширение δ -функции в формуле Кубо–Гринвуда выбиралось равным $\Delta E = 0.2$ эВ.

На рис. 9 (справа) приведена температурная зависимость статического коэффициента электропроводности $\sigma_{1DC} = \sigma_1(0)$ на изохоре 0.954 г/см³. Температурный диапазон можно условно разделить на три участка: от 5 до 10 кК (электропроводность резко возрастает), от 20 до 60 кК (слабое изменение с ростом температуры) и от 60 до 100 кК (слабый рост электропроводности). Резкий рост на участке 5–10 кК, по-видимому, связан с ионизацией атомов углерода, на участке 60–100 кК — с ионизацией атомов водорода.

Результаты седьмой главы опубликованы в работах [17–20].

В восьмой главе с помощью континуального моделирования изучается способ уменьшения влияния предимпульса мощного лазерного импульса на мишень с помощью тонкой пленки из Al или CH₂.

Воздействие субпикосекундных лазерных импульсов с релятивистской интенсивностью $I \gtrsim 10^{19}$ Вт/см² на различные материалы широко используется на практике, особенно для разработки рентгеновских источников, исследования тёплого плотного вещества, быстрого поджига мишеней инерциального термоядерного синтеза, генерации ударных волн и ускорения заряженных частиц. При этом контраст лазерного импульса, определяемый как отношение характерной интенсивности предимпульса к пиковой интенсивности, может оказывать значительное влияние на мишень до прихода основного импульса. Одно из решений этой проблемы состоит в установке перед мишенью тонкой пленки, которая поглощает предимпульс и становится прозрачной для основного импульса к моменту его прихода. Эта проблема моделировалась в одномерном приближении в рамках модели радиационной гидродинамики.

Эволюция параметров сплошного вещества описывается с помощью законов сохранения массы, импульса и энергии для электронной и ионной подсистем в одножидкостном двухтемпературном приближении в форме Лагранжа:

$$\frac{\partial(1/\rho)}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial m} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(P_i + P_e)}{\partial m} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial e_e}{\partial t} + P_e \frac{\partial u}{\partial m} = -\gamma_{ei}(T_e - T_i)/\rho + Q_L/\rho + \frac{\partial}{\partial m} \left(\rho \kappa_e \frac{\partial T_e}{\partial m} \right) - \frac{\partial S}{\partial m}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + P_i \frac{\partial u}{\partial m} = \gamma_{ei}(T_e - T_i)/\rho. \quad (11)$$

Здесь ρ — плотность; t — время; m — лагранжева массовая координата, связанная с пространственной координатой z соотношением $dm = \rho dz$; u — скорость; P , e , T — давление, удельная внутренняя энергия и температура, соответственно. Индексы e и i относятся к электронной и ионной подсистемам. Обмен энергией между электронами и ионами описывается соответствующим членом с коэффициентом электрон–ионного взаимодействия $\gamma_{ei}(\rho, T_e, T_i)$. Перенос тепла характеризуется коэффициентом электронной теплопроводности $\kappa_e(\rho, T_e, T_i)$. Оптические и транспортные свойства плазмы алюминия и серебра описываются широкодиапазонными моделями. Для СН_2 используется аналогичный подход, состоящий в интерполяции между моделью Друде для конденсированного вещества и модели Спичера для идеальной плазмы.

Тормозное поглощение лазерного излучения учитывается с помощью источника тепла $Q_L(t, z)$. Количество поглощённого тепла рассчитывается с помощью решения уравнения Гельмгольца для напряжённости электрического поля лазера (предполагается нормальное падение)

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\omega_L^2}{c^2} \epsilon(z) E = 0,$$

где E — огибающая электрического поля, ω_L — лазерная частота, c — скорость звука, $\epsilon(\rho, T_e, T_i)$ — комплексная диэлектрическая проницаемость. Источник Q_L поглощённого лазерного излучения определяется формулой

$$Q_L(t, z) = I(t) \frac{\omega_L}{c} \text{Im}\{\epsilon(t, z)\} |E(t, z)/E_L(t)|^2,$$

где амплитуда поля лазерного излучения $E_L(t) = \sqrt{8\pi I(t)/c}$.

Перенос излучения учитывается интегралом по спектральному потоку $S = \int_{\omega} S_{\omega} d\omega$. Уравнения переноса излучения записываются в диффузионном приближении:

$$\frac{\partial S_{\omega}}{\partial z} = 4\pi j_{\omega} - \kappa_{\omega} c U_{\omega}, \quad S_{\omega} = -\frac{c}{3\kappa_{\omega}} \frac{\partial U_{\omega}}{\partial z}, \quad S_{\omega}|_{\Omega} = \mp \frac{c U_{\omega}}{2}, \quad (12)$$

где S_ω — плотность радиационного потока, U_ω — лучистая плотность потока, j_ω и κ_ω — излучательная способность и поглощение, соответственно, и Ω — внешняя граница плазмы.

УРС для Al, CH₂ и Ag определяют соотношения $P_e(\rho, T_e)$, $P_i(\rho, T_i)$, $e_e(\rho, T_e)$, $e_i(\rho, T_i)$, необходимые для замыкания системы (8)–(11). Эти УРС основаны на аналитическом выражении для свободной энергии Гельмгольца, которое имеет вид $\mathcal{F}(\rho, T_i, T_e) = \mathcal{F}_i(\rho, T_i) + \mathcal{F}_e(\rho, T_e)$ и состоит из двух частей. Первая часть относится к ионам $\mathcal{F}_i(\rho, T_i) = \mathcal{F}_c(\rho) + \mathcal{F}_a(\rho, T_i)$ и содержит вклады электрон-ионного взаимодействия \mathcal{F}_c (при $T_i = T_e = 0$ К) и теплового движения ионов \mathcal{F}_a . Аналитическая форма \mathcal{F}_i различна для твёрдой и жидкой фаз. Таблицы термодинамических параметров вычисляются с учётом фазовых переходов и метастабильных состояний. Вторая часть $\mathcal{F}_e(\rho, T_e)$ описывает тепловой вклад электронов, вычисленный на основе модели ТФКТ (см. также главу 2). Широкодиапазонные модели комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega, \rho, T_e, T_i)$, электронной теплопроводности $\kappa_e(\rho, T_e, T_i)$ и коэффициента электрон-ионного взаимодействия $\gamma_{ei}(\rho, T_e, T_i)$ для Al и CH₂ разрабатывались с учётом данных первопринципных расчётов и модели ТФКТ.

В начальный момент времени ($t = -2000$ пс) плёнка, передняя поверхность которой имеет координату $z = 0$, представляет собой холодное конденсированное вещество сверхкритической плотности. Излучение лазерного импульса, падающее слева, через плёнку не проходит, и предимпульс не достигает мишени, установленной на расстоянии 600 мкм за плёнкой. Затем происходит расширение плёнки, что приводит к увеличению поглощения энергии до 100%, сильному нагреву плёнки и образованию слоя плазмы перед плёнкой. Постепенно плотность электронов в плёнке падает ниже критического значения, и плёнка становится прозрачной для лазерного излучения. Для различных начальных толщин плёнки наблюдаются различные моменты появления прозрачности, поэтому можно подобрать толщину таким образом, чтобы плёнка становилась прозрачной к моменту прихода основного импульса. При численном моделировании профиль лазерного импульса задавался следующей зависимостью:

$$I(t) = I_{\max} \left\{ C_{\text{ns}} + C_{\text{ps}} \exp \left[-\ln(16)t^2/\tau_1^2 \right] + \exp \left[-\ln(16)t^2/\tau_0^2 \right] \right\},$$

где $I_{\max} = 10^{19}$ Вт/см², $C_{\text{ns}} = 10^{-6}$, $C_{\text{ps}} = 10^{-4}$, $\tau_0 = 0.5$ пс, $\tau_1 = 20$ пс и $-2000 \leq t \leq 20$ пс. Это типичный профиль для петаваттных лазерных установок, а интенсивность предимпульса порядка 10^{13} Вт/см², что достаточно для ионизации диэлектриков в течение нескольких пикосекунд. В качестве материала плёнки ис-

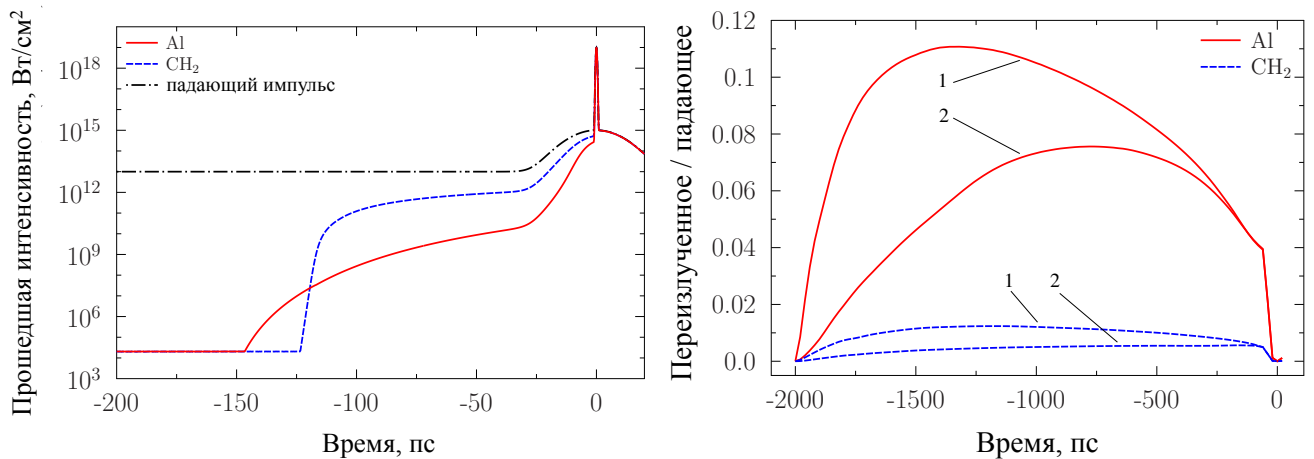


Рис. 10. Слева: интенсивность лазерного излучения, прошедшего через плёнку. — плёнка из Al толщиной 400 нм; - - - - - плёнка из CH_2 толщиной 2250 нм; - · - · - · - падающая интенсивность лазерного импульса. Справа: тепловой радиационный поток на переднюю (1) и заднюю (2) поверхности плёнки из Al и CH_2 . — Al, - - - - - CH_2 .

пользовался Al и CH_2 . Для плёнки из CH_2 модель ТФКТ (глава 2) даёт средний заряд $\langle Z \rangle = 1.12$ при нормальных условиях, что соответствует частично ионизованному сверхкритическому состоянию.

«Оптимальная» толщина плёнки из Al и CH_2 определялась в серии расчётов и составляла 400 и 2250 нм, соответственно. Как видно из рис. 10 (слева), плёнки указанных толщин могут существенно уменьшить уровень прошедшего излучения за время действия предимпульса, после чего образовавшаяся на месте плёнки плазма становится прозрачной для основного субпикосекундного импульса.

Трансформация лазерной энергии в мягкое рентгеновское излучение приводит сильному излучению плазмы, образовавшейся из плёнки, что вызывает предварительный нагрев мишени. На рис. 10 (справа) представлено отношение радиационного потока, проинтегрированного по спектру от 0 до 10 кэВ, к падающей интенсивности $S(t)/I(t)$. Это отношение может достигать 7% на тыльной стороне плёнки из Al (при $t \approx -700$ пс) и до 11% на передней стороне плёнки (при $t \approx -1400$ пс). Этого значения достаточно для того, чтобы существенно нагреть и ионизовать мишень до прихода основного импульса. Расширение мишени заметно уже к моменту времени $t = -1000$ пс. Плазма мишени начинает взаимодействовать с плазмой плёнки при $t \approx -200$ пс и $z \approx 425$ мкм. Характеристическая температура в плазме плёнки составляет около 900 эВ. В расчёте наблюдается последовательное уменьшение электронной плотности в плёнке от сверхкритического значения (при $t = -1000, -500, -200$ пс) до докритического при $t = -100$ пс. Степень ионизации в плазме мишени достигает ≈ 25 , а сама плазма мишени занимает около 150 мкм. В тот же момент времени температура в глубине мишени не превышает

1 эВ, однако присутствие расширяющейся плазмы с околоритической плотностью может изменить взаимодействие основного импульса с мишенью. Следует учесть, что в одномерном моделировании температура плазмы плёнки может быть выше, чем в трёхмерном, так как лазерное пятно ограничено в размерах, а расширение плазмы необходимо описывать в пространстве трёх измерений.

В противоположность рассмотренной ситуации для Al, при использовании плёнки из CH_2 радиационный поток оказывается примерно на порядок величины меньше, рис. 10 (справа), поэтому мишень нагревается предимпульсом относительно слабо. Во время действия предимпульса даже к моменту времени $t = -100$ пс расширение мишени пренебрежимо мало. Температура мишени оказывается порядка 1 эВ, в то время как вещество плёнки полностью ионизируется к моменту времени $t = -100$ пс, и температуры электронов и ионов оказываются примерно 400 и 40 эВ, соответственно. Таким образом, использование пленки из CH_2 оказывается значительно эффективнее для защиты мишени от разрушающего действия предимпульса.

Результаты восьмой главы опубликованы в работах [21; 22].

В Заключение отмечается эволюция квантово–статистических подходов с момента создания квантовой механики и бурное их развитие за последние десятилетия в связи с прогрессом в компьютерных технологиях; обсуждаются также некоторые проблемы, которые предстоит решить в дальнейших исследованиях. Подчёркивается вклад автора диссертации в решение проблемы расчёта теплофизических свойств конденсированных веществ и формулируются полученные результаты:

1. Разработана методика вычисления тепловой части термодинамических функций, в том числе вторых производных термодинамического потенциала, с заданной точностью по моделям Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов.
2. Разработан программный код для вычисления тепловой части термодинамических функций для моделей Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, разработан графический интерфейс для вычисления таблиц термодинамических функций.
3. Разработаны полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния для ряда металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется модель Томаса–Ферми при конечной температуре.

4. Выполнены расчёты давления и энергии для сильнонеидеальной вырожденной смеси водорода с гелием при температурах выше 10 кК с помощью метода Монте-Карло с интегралами по траекториям.
5. Выполнены расчёты кривых плавления алюминия, меди и никеля с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана.
6. С помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана рассчитаны зависимости температуры плавления от электронной температуры для металлических кристаллов алюминия, меди и никеля различной плотности.
7. Выполнены расчеты холодных кривых, теплового давления и электронной теплоёмкости для металлов с помощью псевдопотенциального и полноэлектронного методов функционала плотности с целью выявления границ применимости псевдопотенциалов.
8. Выполнена интерпретация ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и LiD с помощью метода квантовой молекулярной динамики.
9. С помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда получены новые данные по транспортным свойствам плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 , в том числе в двухтемпературном приближении.
10. Проведено одномерное гидродинамическое моделирование воздействия мощного лазерного импульса на тонкую плёнку, установленную перед мишенью, с учётом переноса излучения, выполнены оценки оптимальных толщин плёнок из алюминия и CH_2 для лазерного импульса с заданным временным профилем интенсивности.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model / O. P. Shemyakin [et al.] // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2010. — Vol. 43, no. 33. — P. 335003.
2. *Shemyakin O. P., Levashov P. R., Krasnova P. A.* TFmix: A high-precision implementation of the finite-temperature Thomas–Fermi model for a mixture of atoms // *Computer Physics Communications*. — 2019. — Vol. 235. — P. 378–387.
3. *Shemyakin O. P., Levashov P. R., Khishchenko K. V.* Equation of state of Al based on the Thomas–Fermi model // *Contributions to Plasma Physics*. — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 37–40.
4. Path integral Monte Carlo calculations of dense hydrogen and helium thermodynamics / P. R. Levashov [et al.] // *Journal of Plasma Physics*. — 2006. — Vol. 72, no. 6. — P. 813–816.
5. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas / V. S. Filinov [et al.] // *Phys. Rev. E*. — 2007. — Vol. 75, no. 3. — P. 036401.
6. Monte Carlo calculations of thermodynamic properties of deuterium under high pressures / P. R. Levashov [et al.] // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2008. — Vol. 121, no. 1. — P. 012012.
7. Center-of-mass tomographic approach to quantum dynamics / V. Filinov [et al.] // *Physics Letters A*. — 2008. — Vol. 372, no. 30. — P. 5064–5070.
8. Thermodynamic properties and electrical conductivity of strongly correlated plasma media / V. S. Filinov [et al.] // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2009. — Vol. 42, no. 21. — P. 214002.
9. Ordered structure formation in 2D mass asymmetric electron–hole plasmas / V. S. Filinov [et al.] // *Physics Letters A*. — 2008. — Vol. 372, no. 31. — P. 5208–5214.
10. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state / P. R. Levashov [et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.
11. Thermodynamic functions of the heated electron subsystem in the field of cold nuclei / G. V. Sin'ko [et al.] // *High Energy Density Physics*. — 2013. — Vol. 9, no. 2. — P. 309–314.

12. *Minakov D. V., Levashov P. R.* Melting curves of metals with excited electrons in the quasiharmonic approximation // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Vol. 92, no. 22. — P. 224102.
13. *Chentsov A. V., Levashov P. R.* Isentropic compression of deuterium by quantum molecular dynamics // *Contrib. Plasma Phys.* — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 33–36.
14. Isentropic expansion of copper plasma in Mbar pressure range at “Luch” laser facility / S. A. Bel’kov [et al.] // *J. Appl. Phys.* — 2014. — Vol. 115, no. 3. — P. 033506.
15. Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum / D. Minakov [et al.] // *J. Appl. Phys.* — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.
16. *Minakov D., Levashov P.* Thermodynamic properties of LiD under compression with different pseudopotentials for lithium // *Computational Materials Science.* — 2016. — Vol. 114. — P. 128–134.
17. *Povarnitsyn M. E., Knyazev D. V., Levashov P. R.* Ab initio simulation of complex dielectric function for dense aluminum plasma // *Contributions to Plasma Physics.* — 2012. — Vol. 52, no. 2. — P. 145–148.
18. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Ab initio calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters // *Computational Materials Science.* — 2013. — Vol. 79. — P. 817–829.
19. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two-temperature regime: Ab initio calculation and semiempirical approximation // *Phys. Plasmas.* — 2014. — Vol. 21. — P. 073302.
20. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Ab initio calculation of thermodynamic, transport, and optical properties of CH₂ plastics // *Phys. Plasmas.* — 2015. — Vol. 22. — P. 053303.
21. *Krasnova P. A., Levashov P. R.* Two-phase isochoric Stefan problem for ultrafast processes // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2015. — Vol. 83. — P. 311–316.
22. Laser irradiation of thin films: Effect of energy transformation / M. E. Povarnitsyn [et al.] // *Laser and Particle Beams.* — 2013. — Vol. 31, no. 4. — P. 663–671.
23. *Filinov V. S., Larkin A. S., Levashov P. R.* Uniform electron gas at finite temperature by fermionic-path-integral Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. E.* — 2020. — Vol. 102, no. 3. — P. 033203.

24. *Kozharin A. S., Levashov P. R.* Thermodynamic coefficients of ideal Fermi gas // Contributions to Plasma Physics. — 2021. — Vol. 61, no. 10. — e202100139.
25. *Filinov V. S., Levashov P. R., Larkin A. S.* Thermodynamic properties of the finite-temperature electron gas by the fermionic path integral Monte Carlo method // Phys. Plasmas. — 2021. — Vol. 28, no. 7. — P. 073503.

Научное издание

Левашов Павел Ремирович

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук на тему:

Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество

Подписано в печать _____.

Формат 60 × 90 1/16.

Тираж 100 экз.

Заказ _____.