

На правах рукописи

Морозов Игорь Владимирович

**СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ
ПЛАЗМЕ**

1.3.9 – физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Официальные оппоненты: **Потехин Александр Юрьевич**
доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник сектора теоретической астрофизики ФТИ им. А.Ф. Иоффе

Брантов Андрей Владимирович
доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник сектора лазерно-плазменной физики высоких энергий ФИАН им. П.Н. Лебедева

Бриллиантов Николай Васильевич
доктор физ.-мат. наук, профессор Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»

Защита состоится 28 декабря 2022 г. в 11:00 часов на заседании диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) при ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, экспозал.

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

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

Автореферат разослан «_____» _____ 2022 г.

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



А.В. Тимофеев

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Взаимодействие заряженных частиц играет фундаментальную роль в природе и в наибольшей мере определяет картину окружающего нас мира. За последние десятилетия с использованием положений квантовой механики и квантовой статистики был достигнут огромный прогресс в теоретическом исследовании состоящих из заряженных частиц атомов, молекул и твердых тел. Набор этих теоретических подходов составляет в настоящее время предмет физической химии, физики твердого тела, компьютерного материаловедения и других областей науки. Однако, не менее важным является исследование плазменных сред, в которых электроны и ионы не связаны или частично связаны между собой в атомы или молекулы. Согласно утверждению В.Е. Фортова, в таком состоянии находится около 99 % вещества во вселенной. Особое место среди этих систем занимают так называемые неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (warm dense matter), которые имеют следующие особенности: энергия кулоновского взаимодействия сравнима или превышает кинетическую энергию теплового движения частиц плазмы, что определяет значительную роль столкновений между частицами с рассеянием на большие углы (сильных столкновений); процессы ионизации и рекомбинации атомов (диссоциации молекул) зависят от плотности плазмы из-за воздействия друг на друга соседних атомов и снижения порога ионизации; экранирование зарядов происходит на длине порядка нескольких межчастичных расстояний и не описывается формулой Дебая. Одновременно с эффектами неидеальности в случае разогретого плотного вещества необходимо также учитывать эффекты квантового вырождения электронного газа.

Перечисленные особенности делают неидеальную плазму очень сложным объектом для теоретического исследования, так как а) существенна роль квантово-механических эффектов, поэтому рассмотрение среды в виде газа взаимодействующих классических заряженных материальных точек (классическая плазма) имеет лишь ограниченное применение; б) в отличие от отдельных атомов и молекул число взаимодействующих частиц в плазме достаточно велико и необходимо учитывать коллективные эффекты их движения с учетом дальнедействующего характера кулоновского потенциала; в) теоретические модели, основанные на разложении по малому параметру межчастичного взаимодействия (модель бесстолкновительной или дебаевской плазмы), зачастую дают неверные результаты или требуют учета высоких порядков разложения.

В то же время именно такое состояние вещества встречается как в астрофизических объектах (внутренняя часть планет-гигантов, оболочки белых и коричневых карликов и др.), так и в лабораторных условиях, например, при воздействии на твердотельные мишени коротких лазерных импульсов или потоков заряженных частиц, в прикатодной области электрических разрядов в вакууме и в плотном газе, на фронте мощных ударных волн в газовых и конденсированных средах, при разогреве вещества, предварительно сжатого в алмазных наковальнях, при испарении тонких проволок под воздействием мощного импульса тока.

Среди всех веществ, из которых может быть образована неидеальная плазма, наибольшее число исследований посвящено, по-видимому, плазме водорода, состоящей из протонов и электронов. С одной стороны, этот элемент наиболее прост для теоретического описания, с другой стороны, водородная плазма различной плотности составляет большую часть нашей метагалактики, поэтому интерес к ней вполне естественен. Неидеальность водородной плазмы проявляется при концентрации атомов порядка 10^{20} см^{-3} и температурах порядка 10^4 К .

Отдельное место занимают исследования кластерной наноплазмы, образующейся в результате воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на наноразмерные кластеры. Ожидается, что подобные исследования могут привести к созданию новых методов генерации коротких рентгеновских импульсов или потоков заряженных частиц, что необходимо, например, для исследования быстропротекающих процессов в природе. Ввиду малого размера кластера и существенной пространственной неоднородности плазмы, возникающей при его ионизации, процессы, протекающие в такой системе, имеют свои особенности. В случае умеренных интенсивностей лазерных импульсов (порядка $10^{12} - 10^{15} \text{ Вт/см}^3$) образующаяся наноплазма является неидеальной.

Сходные задачи возникают при исследовании и других неидеальных сред с кулоновским или подобным ему типом взаимодействия, например, пылевой плазмы, в которой частицы микронного размера заряжаются посредством излучения или электронного удара; ультрахолодной плазмы, состоящей из электронов и ионов при температурах ниже 10 мК ; электролитов и расплавов солей; коллоидных растворов заряженных частиц; электрондырочной плазмы в полупроводниках, электрон-позитронной и кварк-глюонной плазмы. Эти системы не являются напрямую предметом исследований настоящей работы, однако некоторые из полученных здесь результатов могут быть применимы и к ним.

Построение современных теоретических моделей редко обходится без использования компьютерного моделирования, поэтому развитие методов моделирования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества является актуальной задачей. Среди различных подходов необходимо выделить класс атомистических методов, позволяющих выполнять моделирование на уровне отдельных ионов и электронов с учетом элементарных процессов взаимодействия частиц, в том числе вдали от термодинамического равновесия. Развитию и применению этих методов, а именно классической молекулярной динамики и молекулярной динамики с волновыми пакетами, для моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, а также созданию на их основе теоретических моделей, и посвящена настоящая работа.

Степень разработанности темы исследования. Тема исследования разработана в достаточной степени. Современное состояние исследований по выбранной теме и обоснование актуальности поставленных задач приведены во введении и обзоре литературы. Последующие главы диссертации описывают взаимосвязанные и дополняющие друг друга фрагменты законченного исследования. Полученные результаты не закрывают проблему в целом, однако являются существенным вкладом в разработку теории неидеальной электрон-ионной плазмы и методов ее компьютерного моделирования. В частности, следует отметить достаточно полное исследование влияния граничных условий на расчет эффективной частоты столкновений в методах классической молекулярной динамики и динамики волновых пакетов, моделирование релаксационных процессов в пространственно-неоднородной плазме с плоской, цилиндрической и сферической геометрией, исследование релаксации и колебаний электронов в кластерной наноплазме, подробное обсуждение преимуществ и недостатков метода молекулярной динамики с волновыми пакетами, дополненное предложениями по устранению каждого из перечисленных недостатков.

Цели и задачи диссертационной работы:

1. Определить влияние граничных условий и возможность учета среднего поля в расчете динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы в длинноволновом пределе методом классической молекулярной динамики. Рассчитать зависимости динамической проводимости и эффективной частоты столкновений в неидеальной плазме от параметра неидеальности, температуры плазмы и частоты возмущающего поля.
2. Исследовать релаксационные процессы в неидеальной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной

дуги. Рассчитать равновесное распределение электронов и заряда в плазме, определить ширину слоя, в котором происходит экранирование потенциала поверхности металла в плазме, а также время его установления.

3. Исследовать релаксационные процессы в цилиндрическом слое неидеальной плазмы, образованной под воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень. Определить характерные времена установления локального равновесия электронов по скоростям, установления двойного слоя на границе плазмы, плавления ионной решетки. Определить снижение концентрации плазмы в треке иона за счет диффузии электронов.

4. Исследовать релаксационные процессы в неидеальной плазме, образованной под воздействием фемтосекундного лазерного импульса на наноразмерный кластер. Определить пространственную структуру, частоты и декременты затухания основных мод колебаний электронов в кластерной наноплазме. Определить величину установившегося заряда кластера в зависимости от его размера, концентрации ионов и температуры электронов.

5. Доработать метод молекулярной динамики с волновыми пакетами для моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, в частности, найти оптимальные решения проблем неограниченного расширения волновых пакетов со временем для электронов вне области сильного взаимодействия, низкой точности описания связанных состояний электронов и ионов в плазме, учета обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов. Исследовать применимость полученного метода для задач моделирования ударно-сжатого водорода, дейтерия и гелия.

Научная новизна. Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

1. Разработана оригинальная методика моделирования электрон-ионной плазмы с учетом среднего поля, с помощью которой получены данные о ее продольной проводимости.

2. Впервые показано совпадение результатов для эффективной частоты столкновений, полученных из расчета продольной и поперечной проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы в длинноволновом пределе с помощью молекулярно-динамического моделирования.

3. Получены новые данные о статической проводимости, а также эффективной частоте столкновений для неидеальной электрон-ионной плазмы в зависимости от частоты возмущающего поля и параметров плазмы, дополняющие и уточняющие предыдущие результаты автора диссертации и других

авторов.

4. Впервые рассмотрено влияние неидеальности плазмы на характеристики двойного электрического слоя вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги. С учетом этих эффектов получены новые данные о распределении заряда и напряженности электрического поля вблизи поверхности металла, а также времени их установления. Предложены полуэмпирические формулы для зависимостей ширины слоя и напряженности электрического поля от средней концентрации электронов.

5. Впервые получены данные о скорости установления равновесного распределения электронов по скоростям, времени установления и пространственном распределении заряда в плазме, образованной под воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень, с учетом эффектов неидеальности.

6. Предложена оригинальная методика исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме, в том числе изучения их пространственной структуры на основе пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока. Получены новые данные о частоте и декременте затухания различного типа колебаний электронов в наноплазме.

7. Разработана оригинальная теоретическая модель, описывающая зависимость частоты поверхностных плазмонов от размера кластера с учетом неоднородного распределения электронов в кластерной наноплазме.

8. На основе данных моделирования уточнена полуэмпирическая модель для определения величины установившегося заряда ионизованного наноразмерного кластера в зависимости от его размера и температуры электронов.

9. Предложен новый способ ограничения ширины волновых пакетов в методе молекулярной динамики с волновыми пакетами, основанный на вычислении энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом.

10. Впервые проведено исследование применимости метода молекулярной динамики с несколькими волновыми пакетами на электрон для описания основного состояния атома водорода и гелия, ионизации атома водорода коротким лазерным импульсом, рассеяния электрона на ионах, что подтвердило корректность данной модели.

11. Получены новые результаты, показывающие возможность учета обменно-корреляционных эффектов на основе формализма электронной плотности в модифицированном методе молекулярной динамики с волновыми пакетами, в частности, для расчета ударной адиабаты дейтерия и изоэнтропы сжатия дейтерия и гелия.

Теоретическая и практическая значимость. Исследование неидеальной электрон–ионной плазмы, с одной стороны, способствует развитию фундаментальных представлений о строении вещества, а с другой стороны, имеет ряд практических приложений. Например, плазма с эффектами неидеальности, полученная в результате воздействия коротких лазерных импульсов на конденсированные мишени, может использоваться как источник рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов с высокими энергиями. Ее исследование необходимо для создания новых методов рентгеновской диагностики вещества с субпикосекундным временным разрешением, инициирования ядерных реакций, задач ядерной фотоники и методов медицинской диагностики. Модификация поверхности фемтосекундными лазерными импульсами является эффективным инструментом создания нанообъектов и поверхностных наноструктур, при этом роль неидеальной плазмы на начальном этапе взаимодействия лазера с поверхностью, может быть достаточно важна. Неидеальная плазма в прикатодной области существенным образом влияет на характер формирования разрядов и повреждения поверхностей, а исследования плазмы, образующейся в вакуумных униполярных дугах, необходимы для защиты микроволновых устройств ввода энергии в ускорительной технике. Неидеальная плазма рассматривается также в задачах метеоритной защиты, воздействия на вещество космического излучения или ускоренных пучков частиц, в частности, при моделировании аварийных ситуаций на крупных ускорителях.

Полученные в данной работе результаты атомистического моделирования могут быть использованы как для построения теоретических моделей, так и в качестве входных параметров для моделирования свойств вещества на больших масштабах методами вычислительной гидродинамики, частиц в ячейке (Particle-in-cell) и др.

Методология и методы исследования. Развитые в работе теоретические модели основаны на методах современной статистической физики, классической и квантовой механики. В частности, используется теория линейного отклика, модели Дебая-Хюккеля и Ландау-Спитцера, теория колебаний Ми, приближения Хартри и Хартри-Фока, теория функционала электронной плотности и др. Результаты, полученные в результате компьютерного моделирования, основаны на атомистических подходах: методах классической молекулярной динамики и Монте-Карло в применении к системам многих частиц с использованием различных псевдопотенциальных моделей, а также методе молекулярной динамики с волновыми пакетами. Для постановки

численного эксперимента используется ряд оригинальных методик, разработанных либо в рамках настоящей работы, либо ранее с участием автора диссертации. Такие методики применяются для исследования различного типа релаксационных процессов, динамической проводимости неидеальной плазмы, колебаний электронов в кластерной наноплазме; моделирования динамики волновых пакетов в приближении Хартри и Хартри-Фока, ограничения ширины волновых пакетов, использования в методе динамики волновых пакетов нескольких гауссовских пакетов на электрон и учета обменно-корреляционных эффектов на основе функционала электронной плотности.

Положения, выносимые на защиту:

1. Теоретическое обоснование возможности применения метода классической молекулярной динамики для расчета динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы в длинноволновом пределе. Методика определения внутренней и внешней динамической проводимости при использовании различного типа граничных условий.

2. Зависимости динамической проводимости и эффективной частоты столкновений в неидеальной плазме от параметра неидеальности, температуры плазмы и частоты возмущающего поля.

3. Время установления равновесного распределения электронов, установившееся пространственное распределение заряда и напряженности электрического поля в неидеальной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги. Зависимости ширины приповерхностного слоя и напряженности поля от концентрации зарядов при различных температурах электронов.

4. Время установления равновесного распределения электронов и установившееся пространственное распределение заряда в цилиндрическом слое неидеальной плазмы, образованной под воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень.

5. Пространственная структура основных мод колебаний электронов в неидеальной кластерной наноплазме в зависимости от размера кластера и температуры электронов. Частоты и декременты затухания поверхностных и объемных плазмонов в кластерной наноплазме с различной степенью неидеальности.

6. Величина установившегося заряда ионизованного наноразмерного кластера в зависимости от размера кластера, концентрации ионов и температуры электронов.

7. Способ ограничения ширины волновых пакетов при моделировании

неидеальной электрон-ионной плазмы методом молекулярной динамики с волновыми пакетами.

8. Модификация метода молекулярной динамики с волновыми пакетами для повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов, а также обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов. Исследование области применимости полученного метода при моделировании ударно-сжатого водорода, дейтерия и гелия.

Степень достоверности и апробация результатов. Все полученные результаты базируются на устоявшихся представлениях статистической физики, классической и квантовой механики. Достоверность результатов подтверждается согласием с имеющимися экспериментальными данными, существующими теоретическими моделями и результатами компьютерного моделирования, проведенного с использованием различных методов.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях и симпозиумах: XIX, XXI, XXVII, XXXVII Международные конференции “Уравнения состояния вещества” (International Conference on Equations of State for Matter), 2004, 2006, 2012, 2022 гг.; 31st EPS Conference on Plasma Physics, 2004 г.; Europhysics Conference on Computational Physics, 2004 г.; Научно-координационные сессии “Исследования неидеальной плазмы” (Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics), 2004, 2005, 2007, 2009 и 2011 гг.; International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS), 2005, 2008 и 2011 гг.; International Workshop on Nonlinear Physics and Mathematics, 2006 г.; 12th, 13th, 14th International Workshop on the Physics of Nonideal plasmas (PNP), 2006, 2009 и 2012 гг.; XXI Международная конференция “Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество” (International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter), 2007 г.; Всероссийская конференция по физике низкотемпературной плазмы (ФНТП), 2007 г.; XXXV, XXXIX Международные (Звенигородские) конференции по физике плазмы и УТС, 2008 и 2012 гг.; Conference on Computational Physics, 2008 г.; 7th, 8th, 10th, 18th Workshop “Complex systems of charged particles and their interaction with electromagnetic radiation”, 2009, 2010, 2012 и 2022 гг.; Всероссийская школа-семинар “Функциональные наноматериалы для космической техники”, 2010 г.; International workshop “Optical response and dynamical structure factor in low-dimensional non-ideal plasmas”, 2011 г.; IEEE International Conference on Plasma Science, 2011 г.; XIII Международный семинар “Супервычисления и математическое моделирование”, 2011 г.; Научно-практическая конференция с международным

участием “Высокопроизводительные вычисления на графических процессорах”, 2012 г.; XXV IUPAP Conference on Computational Physics, 2013 г.; XVII International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories, 2013 г.

Всего работа была представлена автором лично в докладах на 34-х научных конференциях.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 27-ми печатных работах, из них 27 статей в рецензируемых научных журналах. Список публикаций приведен в конце автореферата.

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, 5-ти глав, включая обзор литературы, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 284 страницы, из них 223 страницы текста, включая 83 рисунка и 12 таблиц. Библиография включает 557 наименований на 50 страницах.

Содержание работы

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

В первой главе приведен обзор литературы по методам и результатам экспериментальных исследований неидеальной электрон-ионной плазмы, включая наблюдения за астрофизическими объектами, статические эксперименты, генерацию электрических разрядов, электровзрыв проводников, ударно-волновые эксперименты, воздействие лазерных импульсов и потоков частиц на вещество, исследования ультрахолодной плазмы. Обсуждаются также существующие теоретические модели, основанные на квантово-статистическом подходе, использовании псевдопотенциалов для описания взаимодействия частиц, физической и химической моделях плазмы, формализме электронной плотности. Описаны основные методы атомистического моделирования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества: классическая молекулярная динамика (МД) и Монте-Карло (МК), квантовая молекуляр-

ная динамика (КМД), Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (МКИТ), молекулярная динамика с волновыми пакетами (МДВП), метод силового поля для электронов (СПЭ). Сделаны выводы о степени применимости указанных подходов для решения рассматриваемых задач.

В данной главе определяются также основные параметры плазмы:

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{m_e} \right)^{1/2}, \quad \Gamma = \left(\frac{4\pi n_e}{3} \right)^{1/3} \frac{Z e^2}{k_B T_e}, \quad \theta = \frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2 (3\pi^2 n_e Z)^{2/3}}, \quad (1)$$

где ω_p — ленгмюровская плазменная частота, Γ — параметр неидеальности электрон-ионного взаимодействия, θ — параметр вырождения ($\theta < 1$ для вырожденной плазмы), n_e , T_e , m_e и e — концентрация, температура, масса и заряд электронов, соответственно, Z — заряд ионов. Здесь и далее используется система единиц СГС.

Во второй главе обсуждаются способы расчета статической и динамической проводимости, а также эффективной частоты столкновений в неидеальной электрон-ионной плазме с помощью метода классической молекулярной динамики. Проводимость и связанная с ней диэлектрическая проницаемость являются важными характеристиками плазменных сред, поскольку они определяют поглощение и отражение излучения, которое может использоваться как для нагрева плазмы, так и в диагностических целях [1]. Кроме того, данные величины содержат информацию о столкновительных процессах в плазме [2, 3].

Для определения проводимости методом МД обычно рассчитывается нормированная автокорреляционная функция тока (АФТ) [4, 5]

$$K_{jj}(t) = \frac{\langle \mathbf{j}(t) \mathbf{j}(0) \rangle}{\langle \mathbf{j}^2 \rangle}, \quad \mathbf{j}(t) = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i(t), \quad (2)$$

где \mathbf{v}_i и q_i — скорости и заряды электронов и ионов, \mathbf{j} — суммарная плотность тока, L — длина стороны кубической расчетной ячейки, $N = N_e + N_i$ — полное число электронов и ионов. Усреднение выполняется по начальным моментам времени $\mathbf{j}(0)$ и независимым МД траекториям. Статическая проводимость в рамках теории линейного отклика определяется интегрированием АФТ для проекции плотности тока j^z по времени:

$$\sigma_{dc}^{MD} = \beta L^3 \int_0^\infty \langle j^z(t), j^z(0) \rangle dt = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \int_0^\infty K_{jj}(t) dt. \quad (3)$$

Результаты расчета статической проводимости показаны на рис. 1а вместе с экспериментальными данными и теоретическими моделями. Экспериментальные точки получены на основе выделения кулоновской части проводимости, проведенного в [4]. Из рисунка видно, что формула Ландау–Спитцера [6] становится неприменимой при $\Gamma > 0.2$, а формулы [3, 7, 8], экспериментальные данные, результаты МД моделирования для ультрахолодной плазмы [9] и настоящей работы достаточно хорошо совпадают друг с другом в диапазоне $\Gamma = 0.1 - 1$. В области $\Gamma > 1$ большое значение начинают играть квантовые эффекты электрон–ионного взаимодействия, а также эффекты вырождения электронного газа. Следствием этого являются различия между кривой 2 и кривыми 3, 4, так как модели для кривых 3, 4 не учитывают указанные квантовые эффекты. По той же причине, по-видимому, различаются результаты МД моделирования ультрахолодной плазмы [9], где использовался глубокий кулоновский потенциал, и настоящей работой, где использовался уточненный потенциал Кельбга с квантовыми поправками [10]. Полученная зависимость эффективной частоты столкновений $\nu = \omega_p^2 / (4\pi\sigma_{dc})$ от температуры при фиксированном параметре Γ показана на рис. 1б в сравнении с формулой [8].

В общем случае проводимость и диэлектрическая проницаемость плазмы являются тензорами, зависящими от частоты возмущающего поля ω и волнового вектора \mathbf{k} . Одним из важных вопросов является переход к длинноволновому пределу $k \rightarrow 0$, выполнение которого в МД моделировании из-за конечности расчетной ячейки не является тривиальным. Для теоретического анализа данной проблемы в работе представлена оригинальная методика добавления в МД расчет дополнительного среднего поля, связанного с появлением зарядов на предполагаемой удаленной поверхности плазмы при движении частиц в системе с периодическими граничными условиями (ПГУ). Было показано, что результаты, полученные в рамках этой модели, соответствуют продольной или внутренней проводимости σ^L , в то время как стандартный метод МД моделирования с ПГУ позволяет получить поперечную или внешнюю проводимость σ^T .

На рис. 2а показан пример расчета АФТ без учета дополнительного среднего поля $K_{jj}^T(t)$ и с учетом среднего поля $K_{jj}^L(t)$. Согласно теории линейного отклика и обобщенной формулы Друде динамическая проводимость $\sigma^{L/T}(\omega)$ и эффективная частота столкновений $\nu^{L/T}(\omega)$ выражаются через

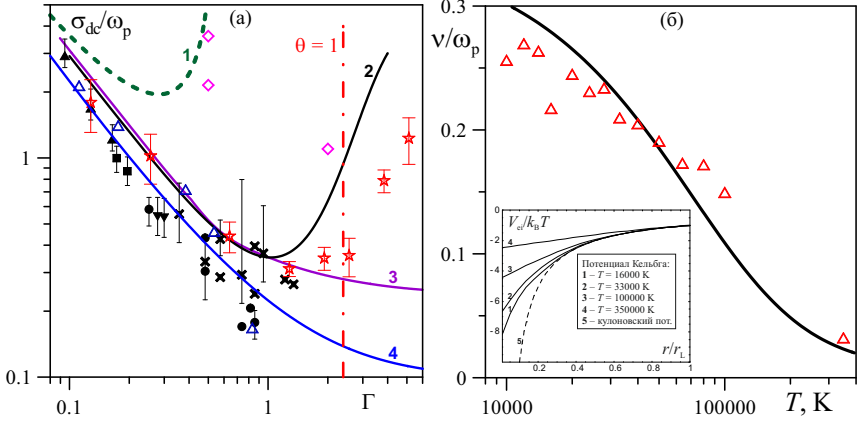


Рис. 1. (а) Статическая проводимость плазмы в зависимости от параметра неидеальности: 1 — формула Ландау-Спитцера [6], 2 — формула [8], 3 — формула [7], 4 — формула [3], черные фигуры — экспериментальные данные (см. [4]), \diamond — МД [5], \triangle — МД [9], \star — настоящая работа (уточненный потенциал Кельбга, $T = 3.3 \cdot 10^4$ К). (б) Эффективная частота столкновений в зависимости от температуры при $\Gamma = 1$: точки — результаты МД, линия — формула [8]. На вставке показан вид потенциала электрон-ионного взаимодействия при различной температуре; $r_L = e^2/(k_B T_e)$.

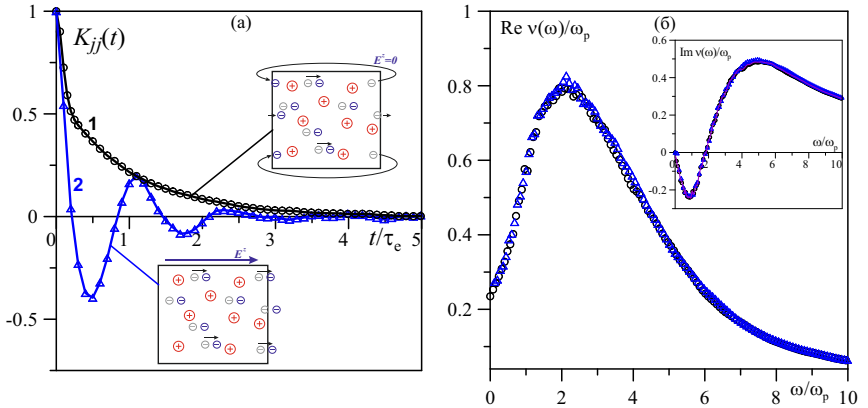


Рис. 2. (а) Нормированная АФТ: 1 — расчет без учета среднего поля $K_{jj}^T(t)$, 2 — с учетом среднего поля $K_{jj}^L(t)$. (б) Действительная часть эффективной частоты столкновений: кружки — расчет без учета среднего поля $\nu^T(\omega)$; треугольники — с учетом среднего поля $\nu^L(\omega)$. На вставке показана мнимая часть $\nu^{L/T}(\omega)$. Параметры плазмы: $T = 3.3 \cdot 10^4$ К, $n_e = 3.85 \cdot 10^{21}$ см^{-3} , $\Gamma = 1.28$.

Фурье-преобразование (спектр) АФТ

$$\frac{\sigma^{L/T}(\omega)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{4\pi} \int_0^\infty e^{i\omega t} K_{jj}^{L/T}(t) dt = \frac{1}{4\pi} K_{jj}^{L/T}(\omega), \quad (4)$$

$$\frac{\nu^L(\omega)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{4\pi\sigma^L(\omega)} + i \left(\frac{\omega}{\omega_p} - \frac{\omega_p}{\omega} \right), \quad \frac{\nu^T(\omega)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{4\pi\sigma^T(\omega)} + i \frac{\omega}{\omega_p}. \quad (5)$$

Совпадение $\nu^L(\omega)$ и $\nu^T(\omega)$ во всем диапазоне частот (рис. 2б) показывает, что оба метода расчета соответствуют длинноволновому пределу.

Расчет спектра АФТ (4) для системы с отражающими граничными условиями (ОГУ) показан на рис. 3а. Из рисунка видно, что в этом случае $K_{jj}(\omega)$, как и при искусственном добавлении среднего поля, описанном ранее, показывает наличие колебаний электронов. Эти колебания, однако, имеют другую частоту и напоминают колебания Ми, типичные для кластерной плазмы (соответствующие частоты с учетом кубической геометрии ячейки показаны на рисунке вертикальными линиями). Колебания с плазменной частотой можно наблюдать, если вычислить АФТ для внутренней области, как показано на рис. 3б, т.е. такой расчет позволяет определить продольную проводимость.

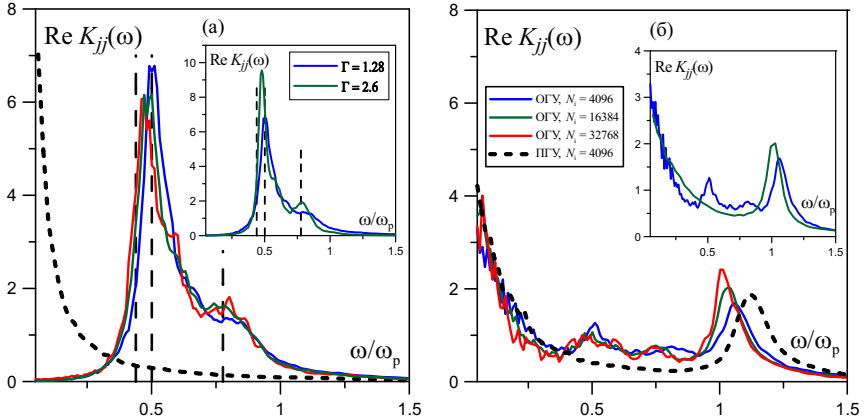


Рис. 3. Спектр АФТ, рассчитанный для (а) всей ячейки с ребром L , (б) внутренней области с линейным размером $L/2$: сплошные линии — расчеты для ОГУ с различным числом частиц N_i (указаны на графике), штриховая кривая — расчет для ПГУ. Вертикальные линии показывают положения резонансов для кубической ячейки. Параметры плазмы на основных графиках: $\Gamma = 1.28$, $T = 3 \cdot 10^4$ К, на вставках показано сравнение результатов для $\Gamma = 1.28$ и $\Gamma = 2.6$.

В третьей главе описано моделирование релаксационных процессов в неидеальной плазме с различным типом пространственной неоднородности. В первом случае была рассмотрена модельная система плоского слоя плазмы, имеющего резкую границу. Эти расчеты позволили сделать предварительную оценку формы установившегося двойного электронного слоя на границе плазмы. Было показано, что время установления равновесия составляет порядка 1 фс, ширина слоя имеет порядок дебаевского радиуса, а влияние неидеальности на профиль электронной плотности невелико.

Следующей из рассмотренных систем была плазма вблизи поверхности металла, возникающая в условиях формирования униполярной вакуумной дуги (рис. 4). Эта задача имеет важное прикладное значение для оценки степени повреждения волноводов микроволновых устройств, использующихся для ввода энергии в ускорительной технике [11]. В результате проведенного моделирования было определено, что характерное время установления равновесного распределения электронов на границе плазмы составляет порядка 100 фс (рис. 5а). На распределении заряда вблизи поверхности металла был обнаружен неэкспоненциальный участок, размер которого зависит от параметра неидеальности плазмы. С учетом этого участка были определены характерная ширина двойного слоя λ , потенциал и напряженность электрического поля в зависимости от температуры и плотности плазмы (рис. 5б). Для этих зависимостей предложены простые полуэмпирические формулы

$$T_e = 1 \text{ эВ} :$$

$$\lambda[\text{нм}] = 1.0 \cdot 10^{11} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.405}, \quad E[\text{ГВ/м}] = 2.57 \cdot 10^{-15} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.577},$$

$$T_e = 10 \text{ эВ} :$$

$$\lambda[\text{нм}] = 3.18 \cdot 10^{12} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.449}, \quad E[\text{ГВ/м}] = 1.21 \cdot 10^{-13} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.531}.$$

Полученные результаты согласуются с пространственным масштабом повреждений поверхностей, наблюдаемых в экспериментах.

Наконец, в третьем случае рассматривалась неидеальная плазма в треке одиночного многозарядного иона в конденсированной мишени. Эта задача имеет важные приложения в области ускорительной техники, медицины, термоядерной энергетики и др. Информация о состоянии вещества внутри ионного трека доступна на основе измерений рентгеновских спектров, излучаемых в результате релаксации возбужденных ионов мишени, имеющих вакансию в К-оболочке [12]. Для правильной интерпретации результатов этих экспериментов необходимо иметь информацию о концентрации электронов

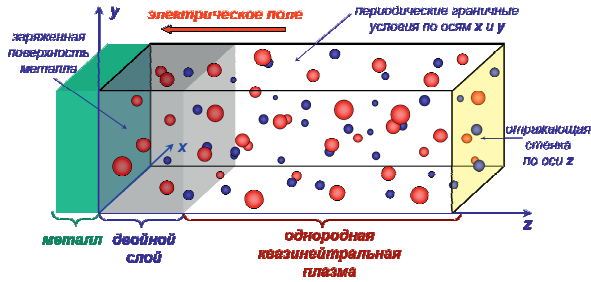


Рис. 4. Схема расчетной ячейки для моделирования приповерхностной электрон-ионной плазмы. Металлическая поверхность располагается слева при $z = 0$. Затемнением показана область двойного электрического слоя.

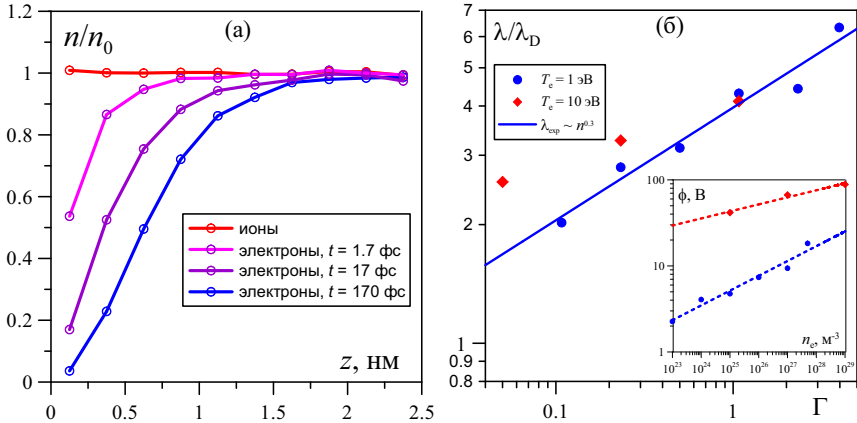


Рис. 5. (а) Профиль концентрации электронов вблизи поверхности металла вдоль оси z (см. рис. 4) для различных моментов времени, указанных на графике. Концентрация нормирована на начальное значение $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, температура электронов $T_e = 1 \text{ эВ}$. (б) Отношение ширины двойного слоя вблизи поверхности металла к классическому радиусу экранирования $\lambda_D = (k_B T_e / (4\pi n_e e^2))^{1/2}$ в зависимости от параметра неидеальности при $T_e = 1$ и 10 эВ . На вставке показан потенциал плазмы вблизи поверхности в зависимости от средней концентрации электронов.

на этапе высвечивания рентгеновских спектральных линий (10-100 фс после ионизации).

В результате МД моделирования было показано, что к указанному моменту времени успевает установиться максвелловское распределение по скоростям для основной части электронов плазмы (рис. 6) и равновесное рас-

пределение концентрации электронов в области двойного слоя на границе трека (рис. 7а), а термализация “горячей” части электронов происходит примерно на временах порядка десятков фемтосекунд (рис. 7б) и не влияет на температуру основной плазмы. Кроме того, показано, что концентрация электронов составляет не менее 85 % от начальной $n_0 = 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ (рис. 7а), а плавление ионной решетки и рекомбинация электронов происходят на временах, превышающих 100 фс. Эти результаты позволили построить корректную модель излучения возбужденных ионов мишени, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными.

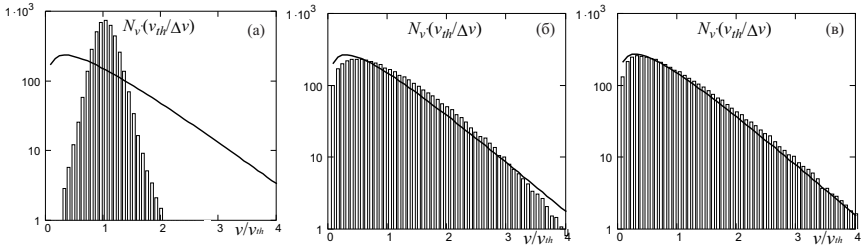


Рис. 6. Распределение электронов по скоростям в последовательные моменты времени в плазме ионного трека: (а) $t = 0.01$ фс, (б) $t = 0.1$ фс, (в) $t = 1$ фс. Скорости нормированы на тепловую скорость v_0 для $T_0 = 50$ эВ. Гистограмма — текущее распределение, кривая — распределение Максвелла для температуры $k_B T = 2K_e/3$, где K_e — средняя кинетическая энергия электронов в указанный момент времени.

В четвертой главе описаны исследования динамики электронов в кластерной наноплазме, образующейся в результате облучения наноразмерных кластеров фемтосекундным лазерным импульсом. Эти исследования были мотивированы экспериментами, в которых наблюдался явно выраженный резонанс лазерного излучения с колебаниями электронов в кластере при облучении их двумя последовательными импульсами с контролируемой задержкой [13]. Поскольку такие резонансы могут быть использованы для определения состояния кластерной мишени и оптимизации параметров облучения с целью, например, увеличения потока генерируемых многозарядных ионов, необходима информация о частотах и декрементах затухания электронных колебаний в ионизованном кластере. При интенсивностях излучения $I = 10^{12} - 10^{14} \text{ Вт/см}^2$ сформировавшаяся наноплазма может иметь заметную степень неидеальности [14].

В данной работе МД моделирование кластерной наноплазмы выполнялось в большинстве случаев при неподвижных ионах, что позволило более

детально изучить динамику и равновесное состояние электронной подсистемы. На рис. 8а показаны профили равновесного радиального распределения электронов в наноплазме в зависимости от размера кластера, а на рис. 8б — заряд кластера Z_{fin} , установившийся в результате частичной внешней ионизации электронов при заданной температуре. Из-за малого размера кластера эмиссия электронов приводит к его охлаждению, поэтому следует указывать начальную T_0 и конечную T_{fin} температуры плазмы. В результате расчетов показано, что заряд кластера в рассмотренной области параметров можно считать пропорциональным произведению T_{fin} на радиус кластера R_i

$$Z_{\text{fin}} = c_1 k_B T_{\text{fin}} R_i, \quad (6)$$

где $c_1 = (0.55 \pm 0.06) (a_B \text{ эВ})^{-1}$. Также показано, что этот результат слабо зависит от выбора модели электрон-электронного взаимодействия.

Для исследования колебаний электронов в наноплазме расчетная область разбивалась ячейки с помощью однородной сетки в сферической системе координат, после чего вычислялась пространственно-разрешенная АФТ

$$K'_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t) = \frac{\langle \mathbf{j}_k(0) \mathbf{j}_l(t) \rangle}{\langle \mathbf{j}^2(0) \rangle}, \quad \mathbf{j}_k(t) = -\frac{e}{\Delta V_k} \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{v}_i(t) \delta_{\Delta V_k}(\mathbf{r}_i(t)), \quad (7)$$

где ΔV_k — объем ячейки, а функция $\delta_{\Delta V_k}(\mathbf{r})$ равна 1, если координата \mathbf{r} находится внутри объема ΔV_k , и 0, если \mathbf{r} находится снаружи. Из спектров $K'_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, \omega)$ для каждой частоты ω составлялась матрица, собственные значения которой определяли основные моды колебаний электронов в кластере.

Этот метод позволил идентифицировать на спектре АФТ (рис. 9) колебания, соответствующие поверхностным и объемным плазмонам. Оказалось, что частота поверхностных плазмонов смещена относительно частоты Ми $\omega_{\text{Mie}} = (4\pi e^2 n_i / 3m_e)^{1/2}$ в красную область спектра, причем величина смещения, как видно из рисунков 9а и 9б, растет при уменьшении размера кластера. Для описания этого эффекта было предложено две теоретических модели, результаты одной из которых показаны на рис. 9б. В ней учтена разница между характерными радиусами распределений электронов R_e и ионов R_i , а также псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия. Полученное

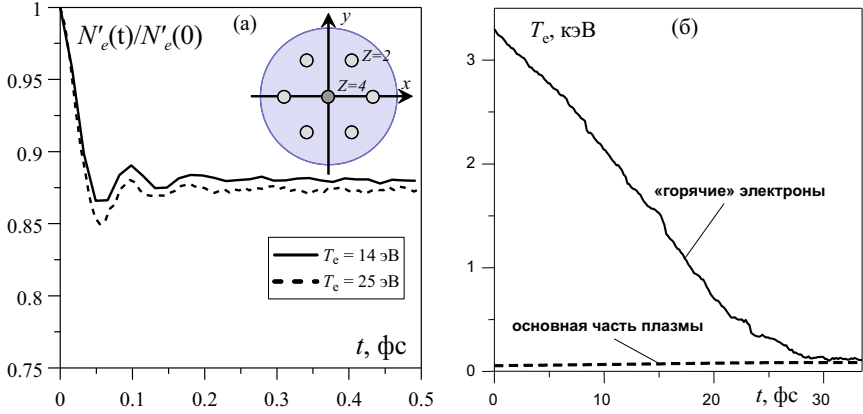


Рис. 7. (а) Зависимость полного числа электронов в области трека тяжелого иона $r < 3.7 \text{ \AA}$ от времени по отношению к его начальному значению для двух значений температур (указаны на графике). Расположение ионов мишени в плоскости, ортогональной направлению движения тяжелого иона, показано на вставке. (б) Термализация «горячих» электронов: сплошная линия — зависимость их мгновенной температуры от времени, пунктирная — средняя температура окружающей плазмы.

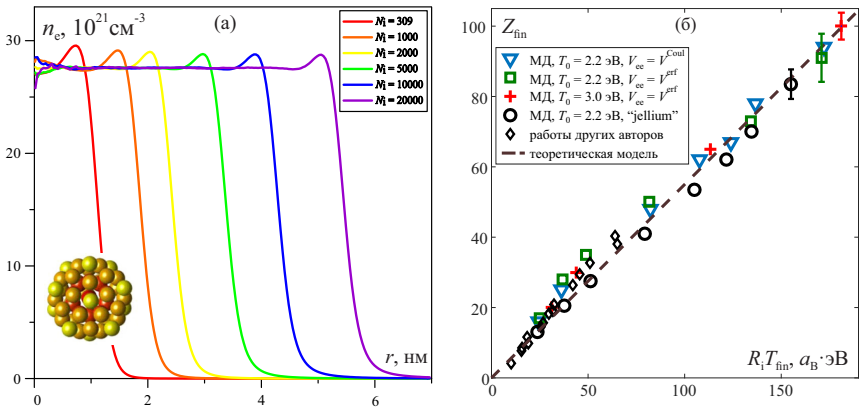


Рис. 8. (а) Равновесные радиальные распределения концентрации электронов в кластерной наноплазме при температуре $T_e = 5 \text{ эВ}$ и концентрации ионов $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Количество ионов в кластере N_i для каждой кривой указано на графике. (б) Установившийся заряд кластера в зависимости от произведения размера кластера на конечную температуру электронов T_{fin} , пунктир — аппроксимация (6), ромбы — результаты [15]. Модель взаимодействия электронов и начальная температура плазмы T_0 указаны на графике.

выражение для частоты поверхностных плазмонов имеет вид

$$\omega_1^2(R_i, R_e) = \omega_{\text{Mie}}^2 \left\{ \frac{R_i^3 + R_e^3}{2R_e^3} \operatorname{erf} \left(\frac{R_i + R_e}{\lambda_{ei}} \right) - \frac{R_i^3 - R_e^3}{2R_e^3} \operatorname{erf} \left(\frac{R_i - R_e}{\lambda_{ei}} \right) + \frac{e^{-\frac{R_i^2 + R_e^2}{\lambda_{ei}^2}}}{\sqrt{\pi} R_e^3} \left[\left(\frac{\lambda_{ei}^3}{2} - \lambda_{ei} (R_i^2 + R_e^2) \right) \sinh \left(\frac{2R_i R_e}{\lambda_{ei}^2} \right) - \lambda_{ei} R_i R_e \cosh \left(\frac{2R_i R_e}{\lambda_{ei}^2} \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

где λ_{ei} — параметр отсечки потенциала на близких расстояниях. Модель (8) хорошо описывает качественный эффект сдвига частоты поверхностных плазмонов, но не учитывает эффекты неидеальности, приводящие к некоторому расхождению с данными моделирования. Также были определены декременты затухания для колебаний Ми и ленгмюровских плазменных колебаний, показанные на вставке в рисунок 9б.

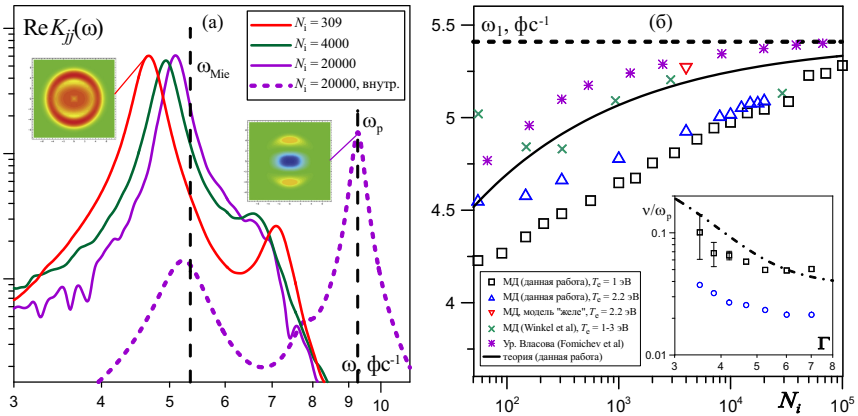


Рис. 9. (а) Спектр АФТ в зависимости от числа ионов в кластере N_i при $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $T_e = 2.2 \text{ эВ}$: сплошные линии — расчет для всего кластера, пунктирная — по внутренней области. Вертикальные линии — частота Ми ω_{Mie} и плазменная частота ω_p . На вставках показана структура колебаний для поверхностных (слева) и объемных (справа) плазмонов. (б) Резонансная частота поверхностных плазмонов в зависимости от количества ионов в кластере: квадраты и треугольники — данная работа для $T_e = 1$ и 2.2 эВ , крестики — [16], звездочки — [17], сплошная линия — формула (8), штриховая — ω_{Mie} . На вставке показана зависимость декремента затухания поверхностных (квадраты) и объемных (кружки) плазмонов от параметра неидеальности для кластера Na_{7100} при $T_e = 1 \text{ эВ}$; кривая — формула [8].

Пятая глава посвящена развитию метода МДВП, расширяющему возможности классической МД. Его идея заключается в представлении волновой электрона в виде гауссовского волнового пакета [18]. Многоэлектронная волновая функция при этом может быть задана либо в приближении Хартри, либо в “неограниченном” приближении Хартри-Фока (Unrestricted Hartree–Fock, UHF) с антисимметризацией волновых функций электронов, имеющих одинаковую проекцию спина на ось z [19]. Второй вариант представления волновой функции для краткости будем называть “приближением Хартри-Фока”, а метод на его основе — МДВПА. Ионы в обоих случаях считаются классическими частицами, спиновая динамика электронов не учитывается.

В работе на различных примерах обсуждаются преимущества и недостатки данного метода. В качестве недостатков указаны: неограниченное расширение волновых пакетов со временем для электронов вне области сильного взаимодействия; невысокая точность представления связанных состояний электронов и ионов для низколежащих квантовых уровней по сравнению с другими квантово-механическими подходами; сложность или недостаточная точность существующих численных алгоритмов для учета многочастичных квантовых эффектов. Решение каждого из этих вопросов обсуждается в соответствующем разделе пятой главы.

В результате проведенных исследований было предложено два варианта решения проблемы неограниченного расширения волновых пакетов со временем. Первый из них основан на ограничении ширины волновых пакетов при выходе электрона из области сильного взаимодействия с ближайшим ионом (рис. 10а). Этот метод не искажает динамику частиц при близких столкновениях частиц и обеспечивает приемлемый результат расчета эффективной частоты столкновений со слабой зависимостью от параметра модели (рис. 10б). Вторым вариантом решения является использование отражающих граничных условий. Этот метод не имеет дополнительных параметров, однако в нем необходим учет приграничного слоя, исследование которого предварительно было проведено на основе классической МД (глава 2).

Вторым результатом является создание модификации метода МДВП с несколькими волновыми пакетами на электрон (МД с расщепленными волновыми пакетами, МДРВП), позволяющей с произвольной точностью параметризовать волновую функцию электрона и обеспечить более точный учет связанных состояний электронов и ионов. В качестве примера на основе этого метода рассчитаны основные состояния атомов водорода (рис. 11а) и гелия, а также рассмотрены туннельная ионизация атома водорода под действием короткого лазерного импульса (рис. 11б) и рассеяние электрона на ансамбле

притягивающих центров. Ограничения применимости здесь связаны в основном с вычислительной сложностью. Результаты, представленные на рис. 11б показывают, что метод МДРВП существенно увеличивает точность расчета вероятности ионизации для малой амплитуды импульса по сравнению с методом Монте-Карло для классических траекторий (МККТ), хорошо описывая, в том числе, и туннельный эффект.

Для учета обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов предложен новый вариант метода МДВП-ФП, основанный на вычислении функционала электронной плотности, используемого традиционно в квантовой молекулярной динамике. В этом методе распределение электронной плотности внутри расчетной ячейки определяется на основе параметров волновых пакетов с учетом их спина. Сопоставление результатов, полученных методами МПВП, МДВПА, МДВП-ФП и СПЭ [21] при расчете уравнения состояния водородной плазмы (рис. 12а), наглядно показывает влияние обменно-корреляционных эффектов при концентрациях электронов $n_e > 10^{22} \text{ см}^{-3}$. В то время как расчеты методом МДВП дают монотонно убывающую зависимость энергии от концентрации, результаты для МДВП-ФП демонстрируют рост энергии при больших плотностях, что полностью согласуется с более сложными с вычислительной точки зрения методами МКИТ и МДВПА. Систематическое расхождение между МДВПА/МДВП-ФП и МКИТ на некоторое константное значение энергии, по-видимому, связано с различным учетом вклада связанных состояний, таких как атомы водорода, молекулы и молекулярные ионы. Эти состояния воспроизводятся методами МДВП и МДВП-ФП, но их энергии не совпадают с точным квантово-механическим результатом при использовании одного волнового пакета на электрон.

Метод СПЭ также позволяет, в отличие от МДВП и классической МД, проводить расчеты при высоких плотностях электронов, однако его результаты для энергии оказываются несколько завышенными. В этой связи целесообразность применения СПЭ для моделирования водородной плазмы вызывает сомнения, однако он может быть полезен для моделирования плазмы из других химических элементов, а также получения оценочных результатов для водородной плазмы в области $n_e > 10^{23} \text{ см}^{-3}$, если задача требует использования большого числа частиц [22].

На рис. 12б показано сравнение расчетных и экспериментальных данных для изоэнтропы гелия. Результаты МДВП-ФП в целом хорошо согласуются с экспериментальными точками, хотя и не описывают скачок плотности, полученный в [24] и повторно исследованный в [25, 26], который связывается с плазменным фазовым переходом. Преимущество МДВП-ФП по сравнению

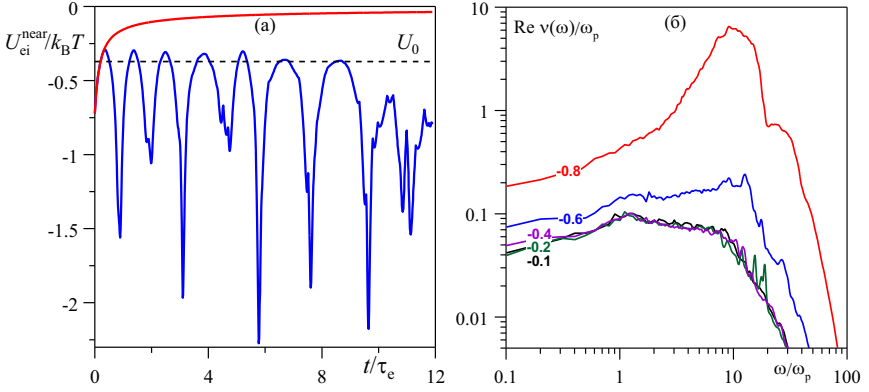


Рис. 10. (а) Ограничение ширины волнового пакета в методе МДВП на основе зависимости энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом U_{ei}^{near} : верхняя кривая — $U_{ei}^{\text{near}}(t)$ без ограничения, нижняя — с ограничением по уровню U_0 (показан пунктиром). (б) Эффективная частота столкновений в зависимости от параметра U_0 (значения $U_0/k_B T$ указаны на кривых). Параметры плазмы: $\Gamma = 1$, $T_e = 3 \cdot 10^4$ К.

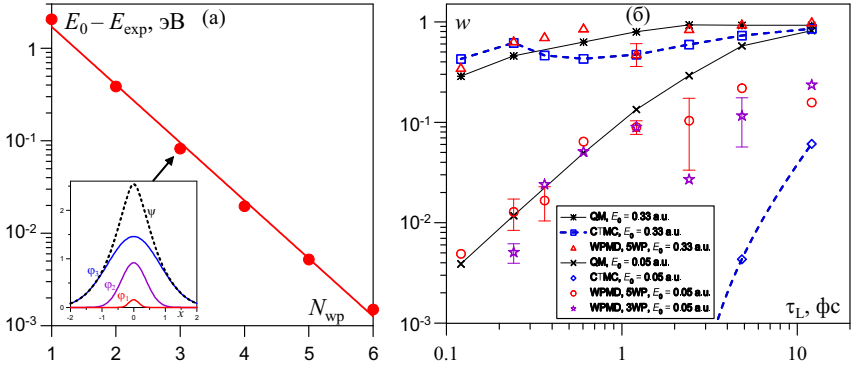


Рис. 11. (а) Разница между рассчитанной методом МДРВП энергией основного состояния атома водорода и ее точным значением в зависимости от числа волновых пакетов на электрон N_{wp} . На вставке показан вид волновых пакетов для $N_{\text{wp}} = 3$. (б) Вероятность ионизации атома водорода лазерным импульсом в зависимости от длины импульса для двух интенсивностей: $E_0 = 0.33$ ат.ед. (верхний набор точек) и $E_0 = 0.05$ ат.ед. (нижний набор точек). Крестики и звездочки — численное решение уравнения Шредингера [20], квадраты и ромбы — расчет методом МККТ (данная работа), треугольники и кружки — результат метода МДРВП для $N_{\text{wp}} = 5$, пятиконечные звезды — то же для $N_{\text{wp}} = 5$.

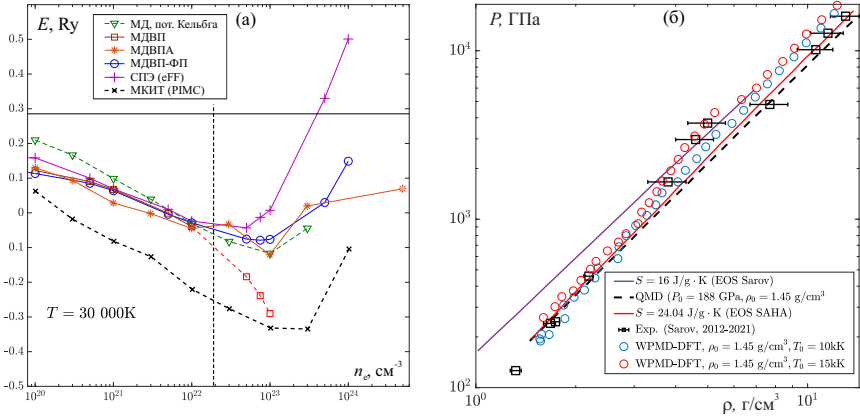


Рис. 12. (а) Расчет средней внутренней энергии на частицу для водородной плазмы в зависимости от концентрации электронов при $T = 3 \cdot 10^4 \text{ K}$ различными методами: треугольники — классическая МД с псевдопотенциалом [10], квадраты — МДВП, звездочки — МДВПА, кружки — МДВП-ФП, плюсы — СПЭ, крестики — МКИТ [23]. Вертикальная линия — граница вырождения $\theta = 1$, горизонтальная линия — энергия идеального газа $E = \frac{3}{2} k_B T$. (б) Зависимость давления от плотности при изоэнтропическом сжатии гелия: ромбы и квадраты — эксперименты [24–26], сплошные линии — расчеты по уравнению состояния и модели SAHA-D [25, 26], пунктир — моделирование методом КМД [26], кружки — моделирование методом МДВП-ФП (данная работа) из различных начальных условий ρ_0, T_0 (показаны на графике).

с методом КДМ заключаются в существенно более быстром расчете изоэнтропы путем прямого моделирования процесса сжатия.

На рис. 13 показан расчет ударной адиабаты дейтерия методом МДВП-ФП в сравнении с экспериментальными данными и расчетно-теоретическими моделями. Результаты, полученные с помощью МДВП-ФП, хорошо воспроизводят максимально достигнутую в экспериментах сжимаемость дейтерия $\rho/\rho_0 = 4.4 \pm 0.1$ и температуру плазмы, однако имеют систематическое завышение по давлению в 1.5 – 2 раза относительно данных экспериментов и расчетов с помощью квантового МК. Этот эффект может быть связан с недостаточной точностью использованного обменно-корреляционного функционала или влиянием граничных условий при недостаточном размере расчетной ячейки. Тем не менее, следует упомянуть, что МДВП-ФП обладает гораздо большим быстродействием, чем методы квантового МК, а его разработка была нацелена в первую очередь на последующее использование для моделирования неравновесных систем и релаксационных процессов. С учетом этого

полученную точностью расчета термодинамических свойств можно считать вполне удовлетворительной.

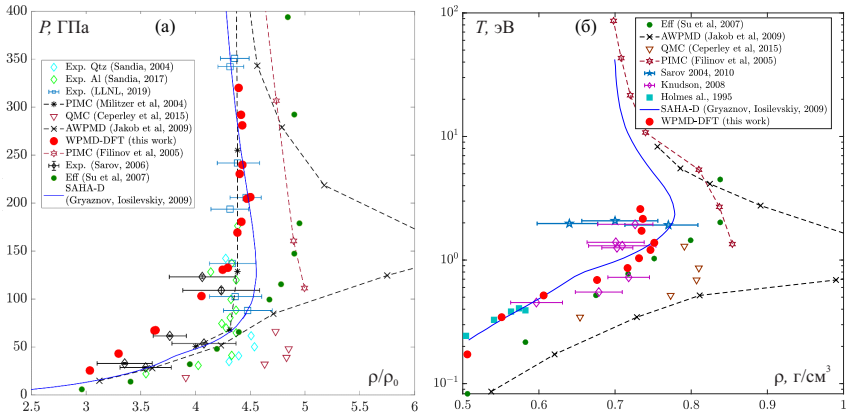


Рис. 13. Ударная адиабата дейтерия: (а) зависимость давления от степени сжатия ρ/ρ_0 , $\rho_0 = 0.167 \text{ г/см}^3$; (б) зависимость температуры от плотности. Экспериментальные данные на рисунке (а): черные ромбы — [27], цветные ромбы — [28]; на рисунке (б): квадраты — [29], синие звезды — [30], фиолетовые ромбы — [31]; теория и моделирование на рисунках (а) и (б): синяя линия — химическая модель SAHA-D [32], черные звездочки и пунктир — МКИТ [33], красные звезды и пунктир — МКИТ [34], треугольники — квантовый метод МК [35], черные крестики и пунктир — МДВПА [19], зеленые кружки — метод СПЭ (данная работа, расчет по методу [21]), красные кружки — МДВП-ФП (данная работа).

Приведенные примеры говорят о том, что метод МДВП-ФП обеспечивает высокую точность расчета термодинамических свойств, сравнимую с методами квантового Монте-Карло и квантовой МД, сохраняя при этом способность описывать неравновесную динамику электронов.

В заключении подводятся итог работы, обсуждаются полученные результаты, а также перспективы дальнейших исследований.

Основные результаты и выводы

1. Обоснован переход к длинноволновому пределу при расчете динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы методом классической МД в случае применения периодических граничных условий.
2. Проведен анализ спектра автокоррелятора тока для системы с отражающими граничными условиями, в результате которого показано, что

данные граничные условия позволяют получить продольную проводимость плазмы при использовании внутренней области расчетной ячейки.

3. Рассчитана статическая проводимость неидеальной плазмы со значением параметра неидеальности $\Gamma = 0.1 - 5$ при различных температурах, показывающая, в частности, существенную роль квантовых эффектов при $\Gamma > 1$ для температур $10^4 - 10^5$ К.

4. Получены новые данные о динамической проводимости, а также эффективной частоте столкновений в неидеальной электрон-ионной плазме в зависимости от частоты возмущающего поля и параметров плазмы, дополняющие и уточняющие предыдущие результаты автора диссертации и других авторов. Определена высокочастотная асимптотика эффективной частоты столкновений при использовании псевдопотенциала Кельбга.

5. Проведено моделирование установления двойного электрического слоя в неидеальной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги. На распределении заряда вблизи поверхности металла обнаружен неэкспоненциальный участок, размер которого зависит от параметра неидеальности плазмы. С учетом этого участка была определена характерная ширина двойного слоя и потенциал поверхности в зависимости от температуры и плотности плазмы. Для указанных зависимостей предложены простые полуэмпирические формулы.

6. Проведено моделирование неидеальной плазмы, образованной воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень. В результате моделирования показано, что к моменту высвечивания наблюдаемых рентгеновских спектральных линий $10 - 100$ фс успевает установиться максвелловское распределение по скоростям для основной части электронов плазмы, а термализация части “горячей” электронов происходит на временах порядка десятков фемтосекунд. Кроме того, показано, что концентрация электронов в области ионного трека составляет не менее 85 % от начальной, а плавление ионной решетки и рекомбинация электронов происходят на временах, превышающих 100 фс. Эти результаты позволили построить корректную модель излучения возбужденных ионов мишени, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными.

7. Разработан метод исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме в рамках классической МД, использующий анализ пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока.

8. Проведено моделирование неидеальной плазмы, образованной воздействием фемтосекундного лазерного импульса на наноразмерные металлические кластеры, состоящие из $55 - 10^5$ атомов. Получены данные о ве-

личине установившегося заряда ионизованного наноразмерного кластера в зависимости от размера кластера, концентрации ионов и температуры электронов. Показано, что заряд кластера в рассмотренной области параметров можно считать пропорциональным произведению конечной температуры электронов на радиус кластера с коэффициентом пропорциональности $0.55 \pm 0.06 (a_B \varepsilon V)^{-1}$.

9. Исследованы частоты и пространственная структура колебаний электронов в равновесной кластерной наноплазме. Разработана теоретическая модель, описывающая полученный в МД моделировании сдвиг частоты поверхностных плазмонов относительно частоты M_i в красную область спектра на 2.4 – 22 % для числа ионов в кластере $10^5 - 55$. Определены декременты затухания для поверхностных и объемных плазмонов в зависимости от параметра неидеальности.

10. Предложен способ ограничения ширины волновых пакетов в методе МДВП, основанный на вычислении энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом.

11. Рассмотрена модификация метода МДВП с использованием нескольких волновых пакетов на электрон для повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов (МДРВП).

12. Рассмотрена модификация метода МДВП с учетом обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов на основе формализма электронной плотности (МДВП-ФП), где суммарная электронная плотность определяется по параметрам волновых пакетов с учетом спина.

13. Проведено сопоставление результатов, полученных методами МПВП, МДВПА, МДВП-ФП и СПЭ для уравнения состояния неидеальной плазмы водорода. На примере расчета ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия показано, что метод МДВП-ФП обеспечивает точность расчета термодинамических свойств, сравнимую с методами квантовых МК и МД, сохраняя при этом способность описывать неравновесную динамику электронов. В частности, получено значение максимальной сжимаемости плазмы дейтерия на ударной адиабате 4.4 ± 0.1 .

Основные публикации по теме диссертации

1. Internal versus external conductivity of a dense plasma: Many-particle theory and simulations / Reinholz H., Morozov I., Röpke G., and Millat T. // *Phys. Rev. E*. — 2004. — Vol. 69, no. 6. — P. 066412.
2. Морозов И. В., Норман Г. Э. Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме // *ЖЭТФ*. — 2005. — Т. 127, № 2. — С. 412–430.
3. Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas / Morozov I., Reinholz H., Röpke G., Wierling A., and Zwicknagel G. // *Phys. Rev. E*. — 2005. — Vol. 71. — P. 066408.
4. Релаксация конденсированной среды после ее возбуждения одиночным быстрым тяжелым ионом / Ланкин А. В., Морозов И. В., Норман Г. Э. и Скобелев И. Ю. // *ДАН*. — 2008. — Т. 419, № 1. — С. 41–46.
5. О релаксации среды после ее возбуждения одиночными быстрыми тяжелыми ионами / Ланкин А. В., Морозов И. В., Норман Г. Э. и Скобелев И. Ю. // *ЖЭТФ*. — 2008. — Т. 133, № 3. — С. 701–717.
6. Морозов И. В., Норман Г. Э., Смыслов А. А. Объемная релаксация в простой жидкости. Молекулярно-динамическое моделирование // *ТВТ*. — 2008. — Т. 46, № 6. — С. 836–843.
7. Optical and Transport Properties in Dense Plasmas Collision frequency from bulk to cluster / Reinholz H., Raitza T., Röpke G., and Morozov I. V. // *Int. J. Mod. Phys. B*. — 2008. — Vol. 22. — P. 4627–4641.
8. Solid-density plasma nanochannel generated by a fast single ion in condensed matter / Lankin A. V., Morozov I. V., Norman G. E., Pikuz S. A. J., and Skobelev I. Y. // *Phys. Rev. E*. — 2009. — Vol. 79. — P. 36407.
9. Morozov I. V., Valuev I. A. Localization constraints in Gaussian wave packet molecular dynamics of nonideal plasmas // *J. Phys. A*. — 2009. — Vol. 42. — P. 214044.
10. Collision frequency of electrons in laser excited small clusters / Raitza T., Reinholz H., Röpke G., and Morozov I. // *J. Phys. A*. — 2009. — Vol. 42. — P. 214048.
11. Strongly coupled nonequilibrium nanoplasma generated by a fast single ion in solids / Faenov A. Y., Lankin A. V., Morozov I. V., Norman G. E., Pikuz Jr S. A., and Skobelev I. Y. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2009. — Vol. 49, no. 7-8. — P. 467–476.
12. Laser excited expanding small clusters: Single time distribution functions / Raitza T., Reinholz H., Röpke G., Morozov I., and Suraud E. // *Contrib.*

- Plasma Phys. — 2009. — Vol. 49. — P. 496–506.
13. Nonequilibrium nonideal nanoplasma generated by a fast single ion in condensed matter / Faenov A. Y., Lankin A. V., Morozov I. V., Norman G. E., Pikuz Jr S. A., and Skobelev I. Y. // *Plasma Phys. Controlled Fusion.* — 2009. — Vol. 51. — P. 331–342.
 14. Морозов И. В. Моделирование кластерной наноплазмы методом молекулярной динамики // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование.* — 2011. — Т. 5, № 1-2. — С. 39–56.
 15. Spatially resolved dynamic structure factor of finite systems from molecular dynamics simulations / Raitza T., Röpke G., Reinholz H., and Morozov I. // *Phys. Rev. E.* — 2011. — Vol. 84. — P. 036406.
 16. Morozov I. V., Valuev I. A. Improvement of Wave Packet Molecular Dynamics using Packet Splitting // *Contrib. Plasma Phys.* — 2012. — Vol. 52, no. 2. — P. 140–144.
 17. Sheath parameters for non-Debye plasmas: Simulations and arc damage / Morozov I. V., Norman G. E., Insepov Z., and Norem J. // *Phys. Rev. Spec. Top.-Accel. Beams.* — 2012. — Vol. 15. — P. 053501.
 18. Wave packet spreading and localization in electron-nuclear scattering / Grabowski P. E., Markmann A., Morozov I. V., Valuev I. A., Fichtl C. A., Richards D. F., Batista V. S., Graziani F. R., and Murillo M. S. // *Phys. Rev. E.* — 2013. — Vol. 87. — P. 063104.
 19. Bystryi R. G., Morozov I. V. Electronic oscillations in ionized sodium nanoclusters // *J. Phys. B.* — 2015. — Vol. 48, no. 1. — P. 015401.
 20. Valuev I. A., Morozov I. V. Extension of the wave packet molecular dynamics method towards the accurate quantum simulations of electron dynamics // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2015. — Vol. 653, no. 1. — P. 012153.
 21. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting Boundary Conditions for Classical and Quantum Molecular Dynamics Simulations of Nonideal Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* — 2016. — Vol. 56, no. 5. — P. 448–458.
 22. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting boundary conditions for classical molecular dynamics simulations of nonideal plasmas // *J. Phys. Conf. Ser.* — 2016. — Vol. 774, no. 1. — P. 012148.
 23. Relaxation and collective excitations of cluster nano-plasmas / Reinholz H., Röpke G., Broda I., Morozov I., Bystryi R., and Lavrinenko Y. // *Phys. Lett. B.* — 2018. — Vol. 51, no. 1. — P. 014001.
 24. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Thermodynamic properties of the nonideal hydrogen plasmas: Comparison of different simulation techniques // *J. Phys. Conf. Ser.* — 2018. — Vol. 946, no. 1. — P. 012097.

25. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Wave packet molecular dynamics–density functional theory method for non-ideal plasma and warm dense matter simulations // *Contrib. Plasma Phys.* — 2019. — Vol. 59, no. 4-5. — P. e201800179.
26. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. High performance wave packet molecular dynamics with density functional exchange-correlation term for non-ideal plasma simulations // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2021. — Vol. 1787, no. 1. — P. 012043.
27. Equilibrium properties of warm dense deuterium calculated by the wave packet molecular dynamics and density functional theory method / Lavrinenko Y., Levashov P. R., Minakov D. V., Morozov I. V., and Valuev I. A. // *Physical Review E.* — 2021. — Vol. 104, no. 4. — P. 045304.

Список цитированной литературы

1. Статистическая физика плотных газов и неидеальной плазмы / Фортов В. Е., Филинов В. С., Ларкин А. С. и Эбелинг В. — М. : Физматлит, 2020. — 672 с.
2. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Проводимость неидеальной полностью ионизованной плазмы: сравнение результатов расчета методом молекулярной динамики и модельного подхода // ТВТ. — 2019. — Т. 57, № 4. — С. 501–508.
3. Khrapak S. A., Khrapak A. G. On the conductivity of moderately non-ideal completely ionized plasma // Results Phys. — 2020. — Vol. 17. — P. 103163.
4. Norman G. E., Valuev A. A. Electrical conductivity of nonideal plasma // Plasma Physics. — 1979. — Vol. 21, no. 6. — P. 531.
5. Hansen J. P., McDonald I. R. Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma // Phys. Rev. A. — 1981. — Vol. 23. — P. 2041–2059.
6. Питаевский Л. П., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 т. — 2-е, испр. изд. — М. : Физматлит, 2007. — Т. X. Физическая кинетика. — 536 с.
7. Валуев А. А., Куриленков Ю. К. Электропроводность плазмы в широком диапазоне плотностей зарядов // ТВТ. — 1983. — Т. 21, № 3. — С. 591–594.
8. Esser A., Redmer R., Röpke G. Interpolation formula for the electrical conductivity of nonideal plasmas // Contrib. Plasma Phys. — 2003. — Vol. 43, no. 1. — P. 33–38.
9. Conductivity and diffusion coefficients in fully ionized strongly coupled plasma: Method of molecular dynamics / Bobrov A. A., Bunkov A. M., Bronin S. Y., Klyarfeld A. B., Zelener B. B., and Zelener B. V. // Phys. Plasmas. — 2019. — Vol. 26, no. 8. — P. 082102.
10. Ortner J., Valuev I., Ebeling W. Semiclassical Dynamics and Time Correlations in Two-Component Plasmas // Contrib. Plasma Phys. — 1999. — Vol. 39, no. 4. — P. 311–321.
11. Norem J., Insepov Z., Hassanein A. An integrated approach to understanding RF vacuum arcs // Sci. Rep. — 2021. — Vol. 11, no. 1. — P. 1–10.
12. Investigations of heavy-ion tracks' energy deposition inside solid media by methods of x-ray spectroscopy / Pikuz Jr S. A., Efremov V. P., Rosmej O., Blazevic A., Korostiy S., Fertman A., Shutov A. V., Norman G. E., and Hoffmann D. H. H. // J. Phys. A. — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4765.

13. Ion and electron emission from silver nanoparticles in intense laser fields / Döppner T., Fennel T., Radcliffe P., Tiggesbäumker J., and Meiwes-Broer K.-H. // *Phys. Rev. A.* — 2006. — Vol. 73. — P. 031202.
14. Probing attosecond kinetic physics in strongly coupled plasmas / Ramunno L., Jungreuthmayer C., Reinholz H., and Brabec T. // *Phys. Lett. B.* — 2006. — Vol. 39, no. 23. — P. 4923.
15. Size Dependence of Minimum Charge of Excited Nano-Plasmas / Reinholz H., Broda I. A. M., Raitza T., and Röpke G. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2013. — Vol. 53, no. 4-5. — P. 263–269.
16. Winkel M., Gibbon P. Spatially Resolved Electronic Correlations in Nanoclusters // *Contrib. Plasma Phys.* — 2013. — Vol. 53, no. 4-5. — P. 254–262.
17. Fomichev S. V., Zaretsky D. F. Vlasov theory of Mie resonance broadening in metal clusters // *J. Phys. B.* — 1999. — Vol. 32, no. 21. — P. 5083–5102.
18. Klakow D., Toepffer C., Reinhard P.-G. Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems // *J. Chem. Phys.* — 1994. — Vol. 101. — P. 10766–10774.
19. Wave packet simulations for the insulator-metal transition in dense hydrogen / Jakob B., Reinhard P.-G., Toepffer C., and Zwicknagel G. // *J. Phys. A.* — 2009. — Vol. 42. — P. 214055.
20. Ionization and excitation dynamics of H(1s) in short intense laser pulses / Hansen J. P., Lu J., Madsen L. B., and Nilsen H. M. // *J. Phys. A.* — 2001. — Vol. 64. — P. 033418.
21. Su J. T., Goddard III W. A. Excited Electron Dynamics Modeling of Warm Dense Matter // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 185003.
22. Fedorov I. D., Orekhov N. D., Stegailov V. V. Nonadiabatic effects and excitonlike states during the insulator-to-metal transition in warm dense hydrogen // *Phys. Rev. B.* — 2020. — Vol. 101, no. 10. — P. 100101.
23. Thermodynamic properties and plasma phase transition in dense hydrogen / Filinov V. S., Bonitz M., Fortov V. E., Ebeling W., Levashov P., and Schlanges M. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2004. — Vol. 44, no. 5-6. — P. 388–394.
24. Phase transition in a strongly nonideal deuterium plasma generated by quasi-isentropic compression at megabar pressures / Fortov V. E., Ilkaev R. I., Arinin V. A., Burtzev V. V., Golubev V. A., Iosilevskiy I. L., Khrustalev V. V., Mikhailov A. L., Mochalov M. A., Ternovoi V. Y., and Zhernokletov M. V. // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99, no. 18. — P. 185001.
25. Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. И.,

- Фортов В. Е., Ерунов С. В., Аринин В. А., Бликов А. О. и др. // ЖЭТФ. — 2021. — Т. 159, № 6. — С. 1118–1133.
26. Сжимаемость неидеальной плазмы дейтерия и гелия до 20 ТПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Ерунов С. В., Аринин В. А. и др. // ЖЭТФ. — 2021. — № 160. — С. 735.
 27. Ударно-волновое сжатие конденсированных изотопов водорода при мегабарных давлениях / Трунин Р. Ф., Борисков Г. В., Быков А. И., Илькаев Р. И., Симаков Г. В., Урлин В. Д. и Шуйкин А. Н. // ЖТФ. — 2006. — Т. 76, № 7. — С. 90–102.
 28. Shock compression of liquid deuterium up to 1 TPa / Fernandez-Pañella A., Millot M., Fratanduono D. E., Desjarlais M. P., Hamel S., et al. // Phys. Rev. Lett. — 2019. — Vol. 122, no. 25. — P. 255702.
 29. Holmes N. C., Ross M., Nellis W. J. Temperature measurements and dissociation of shock-compressed liquid deuterium and hydrogen // Phys. Rev. B. — 1995. — Vol. 52, no. 22. — P. 15835.
 30. Экспериментальное измерение сжимаемости, температуры и поглощения света в ударно-сжатом плотном газообразном дейтерии / Гришечкин С. К., Груздев С. К., Грязнов В. К., Жерноклетов М. В., Илькаев Р. И., Иосилевский И. Л. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 6. — С. 452–458.
 31. Time-resolved optical spectroscopy measurements of shocked liquid deuterium / Bailey J. E., Knudson M. D., Carlson A. L., Dunham G. S., Desjarlais M. P., et al. // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78, no. 14. — P. 144107.
 32. Gryaznov V. K., Iosilevskiy I. L. A model for the equation of state of warm dense hydrogen // J. Phys. A. — 2009. — Vol. 42, no. 21. — P. 214007.
 33. Bonev S. A., Militzer B., Galli G. Ab initio simulations of dense liquid deuterium: Comparison with gas-gun shock-wave experiments // Phys. Rev. B. — 2004. — Vol. 69, no. 1. — P. 014101.
 34. Расчет ударной адиабаты дейтерия квантовым методом Монте-Карло при давлении выше 1 Мбар / Филинов В. С., Левашов П. Р., Бониц М. и Фортов В. Е. // Физика плазмы. — 2005. — Т. 31, № 8. — С. 760–764.
 35. Molecular-atomic transition along the deuterium Hugoniot curve with coupled electron-ion Monte Carlo simulations / Tubman N. M., Liberatore E., Pierleoni C., Holzmann M., and Ceperley D. M. // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Vol. 115, no. 4. — P. 045301.

Научное издание

Морозов Игорь Владимирович

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

на тему:

**СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В
НЕИДЕАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОН–ИОННОЙ ПЛАЗМЕ**

Формат 60 × 90 1/16. Тираж 150 экз.