

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

На правах рукописи
УДК 533.9...15

Морозов Игорь Владимирович

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

1.3.9 – физика плазмы

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2022

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы	16
1.1. Экспериментальные исследования неидеальной электрон–ионной плазмы	16
1.2. Теоретические исследования неидеальной электрон–ионной плазмы	42
1.3. Компьютерное моделирование неидеальной плазмы на основе ато- мистических подходов	58
1.4. Выводы к первой главе	94
Глава 2. Динамическая проводимость неидеальной электрон–ионной плазмы	96
2.1. Статическая проводимость	96
2.2. Динамическая проводимость и эффективная частота столкновений	105
2.3. Расчет динамической проводимости в периодической системе с учетом среднего поля	109
2.4. Расчет динамической проводимости в системе с отражающими границами	120
2.5. Выводы ко второй главе	131
Глава 3. Релаксационные процессы в неидеальной электрон–ионной плазме	133
3.1. Формирование двойного электрического слоя на границе плазма–ваку- ум	134
3.2. Формирование двойного электрического слоя вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги	137
3.3. Релаксация неидеальной плазмы, образованной одиночным мно- гозарядным ионом в конденсированной мишени	146
3.4. Выводы к третьей главе	155

Глава 4. Динамика электронов в кластерной наноплазме	158
4.1. Метод исследования кластерной наноплазмы	158
4.2. Свойства кластерной наноплазмы в зависимости от температуры электронов, плотности и размера кластера	164
4.3. Колебания электронов в кластерной наноплазме	175
4.4. Выводы к четвертой главе	191
Глава 5. Развитие метода волновых пакетов для моделирования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества	193
5.1. Ограничение ширины волновых пакетов	193
5.2. Повышение точности представления волновых функций для связанных состояний электронов и ионов	208
5.3. Расчет обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов	217
5.4. Выводы к пятой главе	227
Заключение	229
Благодарности	233
Список сокращений и условных обозначений	234
Список литературы	235

Введение

Актуальность темы исследования. Взаимодействие заряженных частиц играет фундаментальную роль в природе и в наибольшей мере определяет картину окружающего нас мира. По словам одного из основателей современной статистической физики Дж. Лейбовица: “Свойства тел, которые мы видим и осязаем, почти полностью определяются природой кулоновского взаимодействия, проявляющейся в коллективном поведении взаимодействующих электронов и ядер”. Основываясь на этих представлениях, за последние десятилетия с использованием положений квантовой механики и квантовой статистики был достигнут огромный прогресс в теоретическом исследовании свойств атомов, молекул и твердых тел. Набор этих теоретических подходов, включая методы компьютерного моделирования, 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 заряженные частицы 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 ионов и снижения порога ионизации;
- экранирование зарядов происходит на длине порядка нескольких межатомных расстояний и не описывается формулой Дебая;
- в случае плотной плазмы или разогретого плотного вещества проявляются 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 представление среды в виде газа взаимодействующих классических заряженных материальных точек (классическая плазма) имеет лишь ограниченное применение; б) в отличие от атомов и молекул число взаимодействующих частиц в плазме достаточно велико и необходимо учитывать коллективные эффекты их движения с учетом дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия; 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, оболочка 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 средах 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 неидеальной 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 суще-

ственной пространственной неоднородности плазмы, возникающей при его ионизации, процессы, протекающие в такой системе, имеют свои особенности. В случае умеренных интенсивностей лазерных импульсов (порядка $10^{12} - 10^{15}$ Вт/см³) 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 метастабильных возбужденных атомов при криогенных температурах; электролитов и расплавов солей; коллоидных растворов заряженных частиц; электрон-дырочной 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 методов необходимо выделить класс атомистических подходов, позволяющих выполнять моделирование на уровне атомов, ионов и электронов с учетом элементарных процессов взаимодействия частиц, в том числе для систем вдали от термодинамического равновесия. Развитию и применению этих подходов, а именно методов молекулярной динамики и Монте-Карло, для моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, а также созданию на их основе теоретических моделей, и посвящена данная работа.

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 по-

верхности 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 наноплазме, образованной воздействием фемтосекундной плазмы для металлический 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 моделировании 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 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 в плазме 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 ширины слоя и напряженности электрического поля.
5. Впервые получены данные о скорости установления равновесного распределения электронов и установившемся пространственном распределении заряда в плазме, образованной воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень, с учетом неидеальности плазмы.
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.
8. Получены новые данные о величине установившегося заряда ионизованного наноразмерного кластера в зависимости от размера кластера, концентрации ионов и температуры электронов, описываемые простой полуэмпирической

зависимостью.

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, а также ионизации атома водорода коротким лазерным импульсом, что подтверждает 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. Развитие теории неидеальной плазмы находится в русле общего направления фундаментальных исследований строения вещества и быстропротекающих процессов в природе. В то же время эти исследования имеют и ряд практических приложений. Например, плазма с эффектами неидеальности, полученная в результате воздействия коротких лазерных импульсов на конденсированные мишени, широко используется как источник рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов с высокими энергиями. Это необходимо, в том числе для создания новых методов рентгеновской диагностики вещества с субпикосекундным временным разрешением, инициирования ядерных реакций, задачами ядерной фотоники, медицинскими приложениями.

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.

Результаты атомистического моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы могут быть использованы для построения теоретических моделей, а также 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. Разработанные 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 другие устоявшиеся теоретические модели.

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 моделирования релаксационных процессов, исследования динамической проводимости неидеальной плазмы, применения специального типа граничных условий в методах классической молекулярной динамики и динамики волновых пакетов, исследования релаксации и колебаний электронов в кластерной наноплазме, моделировании динамики волновых пакетов в приближении Хартри и Хартри-Фока, ограничения ширины волновых пакетов, использования в методе динамики волновых пакетов нескольких гауссовских пакетов на электрон, учета обменно-корреляционных эффектов в методе динамики волновых пакетов 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 [1–27].

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.

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 или разогретого плотного вещества: классическая молекулярная динамика и Монте-Карло, квантовая молекулярная динамика, Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям, молекулярная динамика с волновыми пакетами. Сделаны выводы о применимости

указанных подходов для решения актуальных задач физики неидеальной плазмы.

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. Представлены методы расчета в периодической системе с учетом и без учета среднего поля, а также в системе с отражающими границами. Обсуждается переход к длинноволновому пределу, проводится анализ спектров автокоррелятора тока для систем с различными граничными условиями, приводятся результаты моделирования, сопоставленные с соответствующими теоретическими моделями.

В третьей главе описано моделирование релаксационных процессов в пространственно–неоднородной неидеальной плазме. Рассматриваются процессы формирования двойного электрического слоя на границе плазма–вакуум, в том числе вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги. Исследуется релаксация неидеальной плазмы, образованной одиночным многозарядным ионом в конденсированной мишени. Во всех случаях показана структура установившегося двойного электрического слоя в зависимости от параметров плазмы, приведены теоретические оценки и сопоставление с экспериментом.

В четвертой главе описаны исследования динамики электронов в кластерной наноплазме. Рассмотрен метод исследования равновесной наноплазмы, основанный на остановке ионов и термализации электронов, а также метод исследования релаксации электронов и зарядки кластера. Изложен оригинальный подход к исследованию колебаний электронов в кластерной наноплазме на основе расчета пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока. Приведены результаты расчета установившегося заряда кластера, частот и декрементов затухания поверхностных и объемных плазмонов, в зависимости от температуры электронов, плотности и размера кластера. Приводится описание разработанной теоретической модели.

Пятая глава посвящена развитию метода молекулярной динамики с волновыми пакетами. 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 данной главы. Для верификации метода приведены расчеты уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия. В результате делается заключение об эффективности и области применения данного метода.

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

Глава 1

Обзор литературы

1.1. Экспериментальные исследования неидеальной электрон–ионной плазмы

Экспериментальные данные являются основой любой физической теории. Эти данные могут быть получены как из наблюдения за естественными процессами, так и путем создания соответствующих условий в лабораторных условиях. В случае неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества естественные условия реализуется в астрофизических объектах, тогда как в лаборатории эти состояния удастся создать, как правило, на непродолжительный промежуток времени.

В первом подразделе приводятся классификация состояний вещества и вводятся обозначения, используемые далее во всей работе. В последующих подразделах данного раздела описываются способы наблюдения, создания и экспериментального исследования неидеальной электрон–ионной плазмы.

1.1.1. Параметры плазмы и используемые обозначения

Приведем основные определения и обозначения, используемые в работе. Все формулы, кроме специально обозначенных, приведены в системе единиц СГС. Для констант и фундаментальных постоянных выбраны обозначения: k_B — постоянная Больцмана, a_B — радиус Бора. Параметры электрон–ионной плазмы описываются величинами: m_e — масса электрона, m_i — масса иона, Z — заряд иона, n_e и n_i — концентрации электронов и ионов, соответственно, ρ — массовая плотность плазмы, T_e и T_i — температуры электронов и ионов при наличии локального термодинамического равновесия (в случае изотермической плазмы $T = T_e = T_i$). В некоторых выражениях используется также обратная температура электронов $\beta = 1/(k_B T_e)$.

Для описания численной модели и пространственно ограниченной плазмы необходимо определить следующие величины: N_e и N_i — количество электронов

и ионов в рассматриваемой системе, L_x, L_y, L_z — длины сторон прямоугольной расчетной ячейки (L — длина стороны кубической ячейки), V — объем расчетной ячейки. Для неравновесных систем T_e и T_i могут обозначать мгновенные значения кинетических энергий на одну частицу $T_\alpha = 2E_{\text{kin},\alpha}/(3k_B N_\alpha)$, $\alpha = i, e$. С целью сокращения записи большинство формул приведено для плазмы, содержащей только один тип ионов с зарядом Z , выражения для плазмы, содержащей спектр ионов с зарядами Z_α , оговариваются особо.

Концентрация электронов в плазме может характеризоваться отношением среднего расстояния между частицами a (аналог радиуса ячейки Вигнера-Зейца в металлах) к радиусу Бора a_B :

$$r_s = \frac{a}{a_B}, \quad a = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \quad (1.1)$$

Важными параметрами плазмы являются радиус дебаевского экранирования r_D и его обратная величина κ , а также среднее число частиц в сфере Дебая N_D :

$$r_D = \left(\frac{k_B T_e T_i}{4\pi e^2 (n_e T_e + Z^2 n_i T_i)} \right)^{1/2}, \quad \kappa = \frac{1}{r_D}, \quad N_D = \frac{4\pi r_D^3 n_e}{3}, \quad (1.2)$$

ленгмюровская плазменная частота ω_p и период ленгмюровских плазменных колебаний τ_e :

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{m_e} \right)^{1/2} = \left(\frac{3e^2}{m_e a^3} \right)^{1/2}, \quad \tau_e = \frac{2\pi}{\omega_p}, \quad (1.3)$$

энергия Ферми E_F , параметр вырождения θ и тепловая длина волны де Бройля для электронов λ_e :

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_e Z)^{2/3}}{2m_e}, \quad \theta = \frac{k_B T_e}{E_F}, \quad \lambda_e = \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{1/2}. \quad (1.4)$$

Наряду с параметром θ некоторые авторы (см., например, [28]) для оценки степени вырождения используют величину $\Lambda_e^3 n_e$, где $\Lambda_e = \lambda_e/(2\pi)$. Эти величины связаны соотношением $\Lambda_e^3 n_e = 8/(3\sqrt{\pi})\theta^{-3/2}$. Аналогичным образом определяется тепловая длина волны для ионов: $\lambda_i = (2\pi \hbar^2/(m_i k_B T_e))^{1/2}$, $\Lambda_i = \lambda_i/(2\pi)$.

В качестве параметра неидеальности плазмы в данной работе используется

отношение средней потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электронов и ионов к средней кинетической энергии движения электронов

$$\Gamma = \Gamma_{ei} = \left(\frac{4\pi n_e}{3} \right)^{1/3} \frac{Ze^2}{k_B T_e} = \frac{r_L}{a}, \quad (1.5)$$

где $r_L = Ze^2/(k_B T_e)$ — длина Ландау. Аналогичным образом определяются параметры неидеальности для ион–ионного Γ_{ii} и электрон–электронного Γ_{ee} взаимодействий.

Неидеальность плазмы с вырожденной электронной подсистемой, вообще говоря, определяется соотношением $\Gamma_{deg} = Ze^2/(aE_F)$, однако в связи со слабой степенью вырождения для большинства рассматриваемых систем, значение этого параметра в работе не приводятся, а состояние плазмы описывается величинами Γ и θ . Следует отметить, что выражение (1.5) не вполне применимо и для слабоионизованной невырожденной плазмы, в которой взаимодействие частиц в большей степени определяется заряд–дипольным взаимодействием.

Для изотермической однозарядной плазмы $T_e = T_i$, $Z = 1$ дебаевский радиус (1.2) имеет вид $r_D = (k_B T / (8\pi e^2 n_e))^{1/2}$, а параметр неидеальности (1.5) выражается через число частиц в сфере Дебая как $\Gamma = N_D^{-2/3}/6$. В ряде работ встречается также параметр неидеальности $\gamma = e^2 n^{1/3} / (k_B T)$, где $n = n_e + n_i$. При $n_e = n_i$ получаем $\Gamma = (2\pi/3)^{1/3} \gamma$.

На рисунке 1.1 представлена диаграмма в координатах концентрация – температура, на которой обозначены состояния плазмы при различных значениях этих параметров, а также диапазоны температур и концентраций электронов для естественных природных объектов и экспериментальных методов исследования веществ. Одновременно с величиной n_e на правой оси приведена также плотность водородной плазмы в случае полной ионизации.

На диаграмме показаны состояния вещества в зависимости от параметров неидеальности и вырождения. Наименее изученными здесь остаются области невырожденной и вырожденной неидеальной плазмы (области II и III), а также область так называемого разогретого плотного вещества (warm dense matter) V, имеющая более размытое определение. Как правило, разогретым плотным веществом называют состояние, в котором необходимо учитывать как эффекты

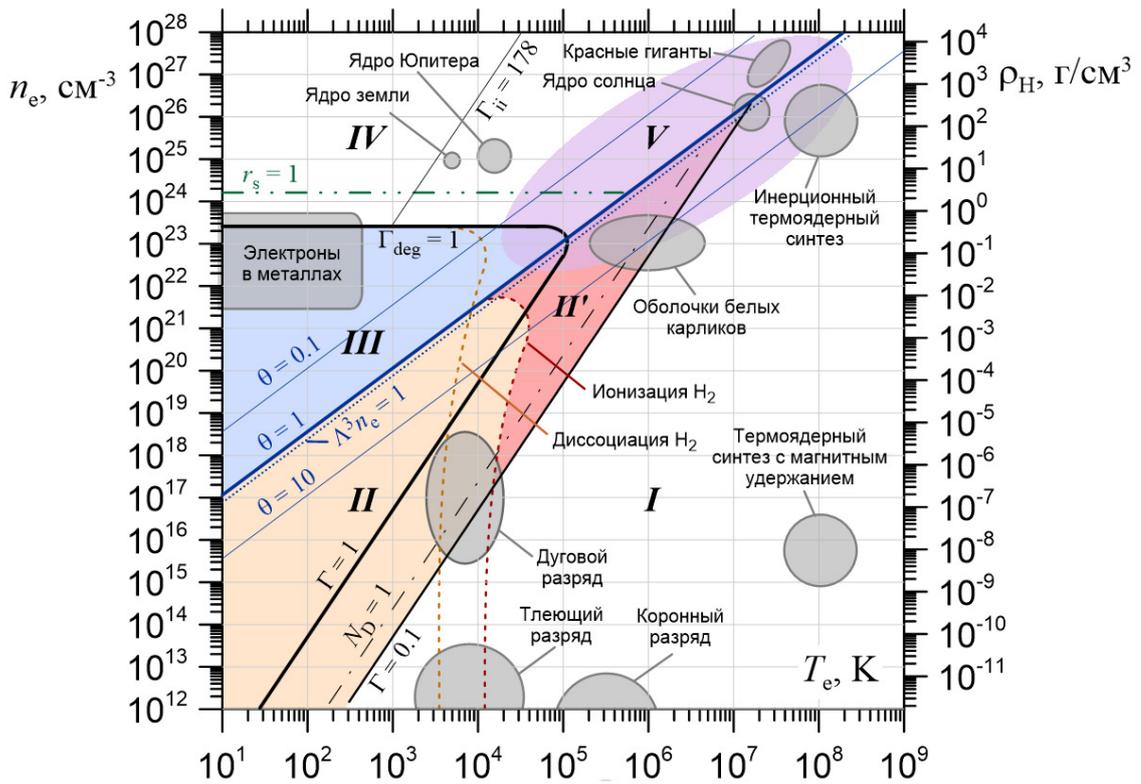


Рис. 1.1. Диаграмма температура (ось абсцисс) – концентрация электронов (левая ось ординат) – плотность водородной плазмы (правая ось). Кривые показывают значения параметров неидеальности Γ и Γ_{deg} (сплошная черная кривая), числа частиц в сфере Дебая N_D (штрих-пунктирная кривая), параметров вырождения θ (сплошная синяя кривая) и $\Lambda_c^3 n_e$ (пунктир), величины r_s . Римскими цифрами обозначены состояния вещества: I — невырожденная (классическая) идеальная плазма, II — невырожденная неидеальная плазма, II' — невырожденная неидеальная плазма водорода с степенью ионизации более 50 %, III — вырожденная неидеальная плазма, IV - вырожденный идеальный газ электронов, V — разогретое плотное вещество; овалами выделены области параметров вещества в различных естественных условиях и технологических процессах, а также в экспериментах по исследованию экстремальных состояний вещества [29–31].

вырождения, так и эффекты кулоновской неидеальности [31], т.е. это состояние вещества имеет признаки как твердого тела, так и плотной плазмы. Данная область наиболее трудна для построения теоретических моделей, но при этом ее исследование имеет большой фундаментальный и практический интерес.

Следует отметить, что кривая неидеальности также достаточно условна, так как эффекты неидеальности во многих случаях следует учитывать уже при $\Gamma > 0.1$ (эта граница проходит немного ниже кривой $N_D = 1$).

Роль связанных состояний электронов и ионов, образующих нейтральные атомы в основном или возбужденном состояниях, согласно оценке [29], существенно возрастает при температурах $k_B T < I/10$, где I — потенциал ионизации атома. Для водорода, например, эта граница проходит при $T \approx 15000$ К. Оценки

для кривых 50 % диссоциации молекул H_2 и 50 % ионизации атомов водорода из [32] показаны на диаграмме пунктирными линиями. Для $\Gamma < 0.1$ эти результаты получены из уравнения Саха без учета эффектов неидеальности, для $\Gamma > 0.1$ кривые продолжены на основе данных [33] с учетом оценки снижения потенциалов ионизации и диссоциации в неидеальной плазме. Наименьшей энергией ионизации обладают щелочные металлы, для них кривая ионизации проходит в ~ 2.5 раза ниже по температуре.

При температурах существенно ниже порога ионизации вещество также может находиться в состоянии плазмы, если это состояние является неравновесным. Типичным примером такой системы является ультрахолодная плазма с температурой электронов в диапазоне 1 – 1000 К [34], более подробно рассмотренная в разделе 1.1.8.

Выше кривой $r_s = 1$ возникает перекрытие электронных оболочек соседних атомов, что приводит к ионизации давлением. Для теоретического анализа вещества в этой области часто используется модель однокомпонентной плазмы, в которой классические ионы рассматриваются на однородном нейтрализующем фоне отрицательного заряда. При параметре неидеальности для ионов $\Gamma_{ii} > 178$ ионы образуют кристаллическую решетку, что приводит, в частности, к появлению металлической фазы водорода.

В данной работе нас будет интересовать в первую очередь неидеальная электрон–ионная плазма с высокой степенью ионизации и малым или умеренным вырождением электронного газа. На рисунке 1.1 этому соответствует область II (для равновесной водородной плазмы — II'), а также части областей III и V, прилегающие к кривой $\theta = 1$. В указанных областях ионы можно считать классическими частицами, так как вырождение ионной компоненты и другие квантовых свойства атомных ядер проявляются при значительно больших плотностях, при которых параметр вырождения для ионов $\Lambda_i^3 n_i$ становится близким к единице.

Мы также ограничимся рассмотрением температур, не превышающих 10^6 К, при которых можно пренебречь релятивистскими эффектами движения электронов. Ввиду того, что рассматриваемые плазменные образования или моделируемые фрагменты плазмы имеют размеры порядка нескольких нанометров, не будут рассматриваться и электродинамические явления, такие как, поглощение или из-

лучение электромагнитных волн, релятивистское запаздывание взаимодействия и др. Таким образом, взаимодействие между частицами плазмы будет считаться электростатическим и дальнедействующим (не запаздывающим).

1.1.2. Наблюдения за астрофизическими объектами

Как видно из рис. 1.1 условия, при которых неидеальная плазма может существовать в стационарном состоянии, далеки от нормальных условий на поверхности Земли. Однако, в таком состоянии находится значительное количество вещества во вселенной (около 99 % видимой материи разогрето до температуры более 10^5 К [30,35]), поэтому наблюдение за соответствующими астрофизическими объектами, может дать необходимую информацию о свойствах неидеальной плазмы и разогретою плотного вещества.

Примерами таких объектов являются гигантские планеты, во внутреннем слое которых находится сжатая до давлений в несколько Мбар смесь водорода и гелия [36–39]. Эта смесь может находиться в различных фазовых состояниях, часть из которых может быть отнесена к разогретому плотному веществу. Экспериментально наблюдаемыми здесь являются: масса и момент инерции планеты, состав атмосферы, гравитационные аномалии и др. Важным вопросом для объяснения наблюдаемых данных является смешиваемость водорода и гелия на различном удалении от центра планеты, а также возможность плазменного фазового перехода в водороде (см. раздел 1.1.5), определяющего наличие резкой границы между слоями с малым и большим содержанием гелия. В связи с большим объемом наблюдений основная часть работ в данной области посвящена анализу и численному моделированию вещества в недрах Юпитера [40–42] и Сатурна [43, 44].

Другим классом наблюдаемых астрофизических объектов являются звезды. Наибольший интерес здесь представляют коричневые [36,37] и белые [45] карлики, а также оболочки нейтронных звезд [46]. Их исследования также связаны с определением свойств водорода дейтерия при высоких давлениях, в частности, металлического водорода в жидком и кристаллическом состояниях. Не меньшей интерес представляют и исследования солнечной плазмы. Важную информацию здесь дает, например, анализ колебаний поверхности солнца (гелиосейсмология) [47], позво-

ляющий построить модели уравнения состояний солнечной плазмы в конвективной зоне [48,49]. Неидеальная плазма играет также важную роль и в исследованиях высокоскоростных ударов метеоров по поверхности космических аппаратов [50].

Подробный обзор методов наблюдения за астрофизическими объектами и создания неидеальной плазмы в лабораторных условиях представлен, например, в работе [51].

1.1.3. Статические эксперименты

Исторически одним из первых методов исследования неидеальной плазмы был омический нагрев веществ в печах под большим давлением [52]. Ограничением такого метода является стойкость конструкционных материалов (капсул) при высоких температурах и давлениях. Обычно температуры образцов в этом методе не превышают 3000 К. Тем не менее, для исследования паров щелочных металлов, имеющих низкую энергию ионизации (3.9 эВ для цезия), метод оказался вполне пригодным.

В последнее время исследование экстремальных состояний вещества в статических условиях чаще всего проводится с использованием алмазных наковален [53,54]. Этот метод появился в конце 1950-х годов и использовался для изучения широкого класса веществ при высоких давлениях. Уникальными свойствами алмаза являются его твердость, а также хорошая проницаемость для излучения в диапазоне от инфракрасного до рентгеновского, используемого с целью диагностики сжатых образцов. Рекордные давления, полученные в алмазных наковальнях, на данный момент превышают 1 ТПа [55]. В частности, с помощью такого типа экспериментов получены свидетельства о металлизации твердого атомарного водорода (перехода Вигнера-Хантингтона) при давлениях около 500 ГПа и криогенных температурах [56].

Исследования в алмазных наковальнях могут проводиться как при низких, так и при высоких температурах (до 5700 К [57]). Однако, эти условия все еще не вполне соответствуют плотному разогретому веществу, поэтому в последнее время стали развиваться методы совмещения статических и динамических экспериментов. Одной из первых таких работ стал эксперимент [58], в которой рассмат-

ривалось распространение ударной волны в водороде, предварительно сжатом до давления 0.7 – 1.2 ГПа в алмазной наковальне. Ударная волна инициировалась лазерным импульсом. В последующих работах [59–64] этим способом удалось исследовать ударные адиабаты водорода, дейтерия и гелия для давлений до 180 ГПа, хотя эти установки требуют очень высоких интенсивностей лазерного излучения и поэтому доступны лишь в нескольких лабораториях.

1.1.4. Электрические разряды и электровзрыв проводников

Метод изобарического нагрева проводников в капиллярах [65] или в атмосфере инертного газа [66] путем пропускания мощного импульса тока положил начало динамическим экспериментам для получения и исследования проводимости неидеальной плазмы. В качестве рабочего тела в этих экспериментах в первую очередь использовались щелочные металлы (жидкий цезий, проволочки из калия, натрия или лития), по которым пропускался импульс тока, достаточный для испарения (электровзрыва) и ионизации вещества. Основным недостатком этого метода является сильная пространственная неоднородность плазмы, вызванная развитием неустойчивостей и стратификацией разряда.

В [67] были проведены измерения проводимости плазмы алюминия и меди при температурах $(1 - 3) \cdot 10^4$ К, образующейся при взрыве тонкой проволоки исследуемого вещества в воде. Наиболее значимым результатом работы стало определение минимумов на зависимостях проводимости от плотности, которые указывают на фазовый переход металл-неметалл. При этом в работе отмечается недостаток данных по уравнению состояния вещества (использовалась модель SESAME), необходимых для определения температуры плазмы. Более точный анализ этих экспериментов с применением компьютерного моделирования стал возможен лишь с появлением широкодиапазонных уравнений состояний вещества (см. раздел 1.2.3).

Дальнейшее совершенствование экспериментов в этой области было направлено на обеспечение равномерности нагрева исследуемого вещества. В это связи следует отметить методику электровзрыва тонких фольг, помещенных между пластинами прозрачного материала, позволяющего использовать оптические методы

диагностики [68]. С помощью этой методики удалось исследовать указанный выше переход металл-неметалл в жидком железе [69], фольфраме [70], углероде и графите [71], а также других веществах.

Другим способом, позволяющим получить неидеальную плазму с концентрацией зарядов $10^{18} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$ в состоянии локального равновесия является использование электрических разрядов высокого давления [72]. Наибольшая концентрация зарядов здесь достигается в случае импульсных разрядов в жидкости [35, 73, 74]. В некоторых из этих экспериментов для инициирования разряда используется тонкая проволока, что близко к постановке упомянутого выше эксперимента [67].

Описание разрядов в вакууме (вакуумных дуг) также требует привлечения теории неидеальной плазмы, возникающей на поверхности катодного пятна и в прикатодной области [75–77]. Интересным и практически значимым является, например, исследование униполярных дуг, образующихся под воздействие мощного микроволнового излучения на поверхности металла в современных ускорителях и токамаках [78–80]. Моделирование такой плазмы обсуждается в разделе 3.2.

Еще одно направление исследования прикатодной плазмы связано с наносекундными искровыми разрядами в воздухе [81, 82]. В указанных работах на основе лазерных интерферограмм, тенеграм, и шпирен-изображений с высоким пространственным (до 3 мкм) и временным (до 1 – 2 нс) разрешением исследована эволюция плазмы с температурой 1 – 5 эВ и концентрацией электронов $10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$, возникающей в области катодного острия. Для описания коэффициента отражения и поглощения диагностического излучения авторы использовали модель комплексной диэлектрической проницаемости идеальной плазмы, однако оценки показывают, что здесь более уместна была бы модель проводимости неидеальной плазмы, рассмотренная в главе 2.

1.1.5. Ударно-волновые эксперименты

В данном подразделе описывается неидеальная плазма, получаемая на фронте ударных волн в газах и твердых телах. В этом случае разогрев вещества происходит за счет адиабатического сжатия и диссипации энергии на фронте волны. Обзор

методов генерации и исследования ударных волн приведен в [83, 84]. В лабораторных условиях наибольшее распространение получили методы инициирования ударных волн, основанные на использовании мощных лазеров и конденсированных взрывчатых веществ.

Ударно-волновые эксперименты по исследованию неидеальной плазмы воздуха, неона, аргона и ксенона были начаты в 1970-х годах [35, 85]. Выбор в последующем инертных газов, преимущественно ксенона, был связан с отсутствием потерь энергии на диссоциацию молекул, относительной простотой интерпретации спектральных данных и высокой молярной массой (для ксенона). Например, в работе [86] на фронте ударной волны в ксеноне получена плазма с температурой $T = (1 - 3) \cdot 10^4$ К и концентрацией электронов $n_e = 10^{18} - 2 \cdot 10^{21}$ см⁻³, при которых параметр неидеальности достигает $\Gamma \leq 3$.

В первых работах подобного типа измерения статической проводимости плазмы проводились зондовым методом [86]. Дальнейшее развитие инструментов диагностики на основе коэффициента отражения лазерного излучения от фронта ударной волны позволило получить данные о динамической проводимости неидеальной плазмы ксенона, однако результаты этих экспериментов поставили и ряд новых вопросов. Так в [87] получена зависимость коэффициента отражения лазерного излучения R на длине волны $\lambda = 1.064$ мкм от плотности ксеноновой плазмы в диапазоне параметров $T \approx 3 \cdot 10^4$ К, $n_e = (1.8 - 9.1) \cdot 10^{21}$ см⁻³, $\Gamma = 2 - 7$, а в работе [88] опубликованы аналогичные данные для длины волны диагностического излучения $\lambda = 0.694$ мкм.

Сопоставление этих данных приводит к следующим противоречиям. Согласно классической формуле Друде зависимость проводимости плазмы от частоты падающего излучения ω имеет вид

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi\nu - i\omega}, \quad (1.6)$$

где частота столкновений ν определяется параметрами плазмы. Однако результаты указанных выше экспериментов можно описать, только допустив зависимость ν от ω . Кроме того, форма полученных зависимостей R от ω_p/ω не может быть описана формулой Френеля для отражения излучения от слоя с резкой границей. Наконец,

абсолютные значения ν , которыми можно описать результаты измерений, почти на порядок отличаются от известных формул для бесстолкновительной плазмы [89].

Теоретический анализ экспериментов [86, 87] был проведен позже в работах [90, 91], где было введено понятие динамической проводимости $\nu(\omega)$, предпринята попытка оценить ее значение в рамках борновского приближения для описания столкновений частиц, учтено распределение микрополей в плазме, а также рассмотрено влияние конечной ширины отражающего слоя, связанной с неоднородностью плазмы на фронте ударной волны. В [92–95] предложена уточненная модель фронта ударной волны, а значения $\nu(\omega)$ были определены как на основе результатов компьютерного моделирования [92, 95], так и с помощью квантово-статистических методов [93, 94]. Это позволило с хорошей точностью описать экспериментальные данные.

В последующем исследовании ударно-сжатой ксеноновой плазмы были продолжены: проведены измерения коэффициента отражения на длине волны $\lambda = 0.532$ мкм [96], исследовано отражение s- и p-поляризованного излучения, падающего на поверхность плазмы под разными углами [97–101], усовершенствована теоретическая модель, позволившая объяснить результаты этих экспериментов. В работах [102–104] расчеты коэффициента отражения проведены на основе результатов моделирования неидеальной плазмы ксенона методом функционала электронной плотности (см. раздел 1.3.4).

В целом создание новых экспериментальных методик и развитие методов компьютерного моделирования позволили за прошедшие 30 лет прояснить ситуацию с аномальным коэффициентом отражения от ксеноновой плазмы, обнаруженным в [86, 87]. Однако, задачи разделения эффектов неидеальности и нерезкого фронта ударной волны, расчета формы фронта из гидродинамических моделей, получения точного выражения для диэлектрической проницаемости плазмы пока еще не решены до конца.

Рассмотрим теперь ряд работ по генерации ударных волн в твердых телах, инициируемых как взрывчатыми веществами (в первых работах), так и мощными лазерными импульсами (преимущественно с 1990-х годов). Эти экспериментальные методы широко использовались для исследования фазовых превращений при высоких давлениях, окольной прочности и других практически важных характе-

ристик твердых тел [83, 84]. Однако, при определенных условиях состояния на фронте ударной волны соответствуют определению разогретого плотного вещества или неидеальной плазмы.

В отличие от газовых мишеней, диагностика состояния плазмы здесь изначально основывалась лишь на поведении поверхности образца при выходе на нее ударной волны. Например, в [87] исследовался коэффициент отражения от поверхности кремния, демонстрирующий резкий рост проводимости плазмы на фронте ударной волны. С помощью коэффициента отражения от свободной поверхности, но с инициированием ударной волны лазерными импульсом, в [105] измерена проводимость плазмы алюминия. Измерения временной зависимости коэффициента отражения от ударно-сжатой плазмы алюминия представлены в [106], при этом значения проводимости оказались на порядок меньше теоретических оценок.

В [107] приведен расчет параметров концентрации и температуры ионов в ударно-сжатой плазме кремния $n_i = (1.17 - 1.34) \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, $T_i = 2.4 - 4.7 \text{ эВ}$, который говорит о высокой степени неидеальности для ионов $\Gamma_{ii} = 40 - 76$. В работе также показано, что плазма изначально является неизотермической с $T_i > T_e$, где T_e — температура электронов из зоны проводимости. Измерение излучения от поверхности образца с временным разрешением 20 пс и сопоставление результатов измерений с расчетной гидродинамической моделью позволило получить оценку характерного времени электрон–ионной релаксации $\tau = 250 \text{ пс}$, которая на два порядка превосходит значение, полученное по формуле Ландау-Спитцера [89, 108].

Прорывом в развитии диагностики ударно-сжатого вещества стало создание методов, основанных на рассеянии рентгеновского излучения на электронах. В одной из первых работ [109] рентгеновское излучение с энергией фотонов 4.75 кэВ использовалось для исследования ударно-сжатого алюминия. В результате сравнения экспериментальных и расчетных угловых зависимостей для сечения томповского рассеяния был подтвержден результат [107] о значительном замедлении электрон–ионной релаксации по сравнению с теорией идеальной плазмы. Этот вопрос обсуждается и во многих последующих работах [110, 111].

Использование неупругого (комптоновского) рассеяния позволило получить еще больше информации о свойствах вещества, в частности, определить темпе-

ратуру, плотность, динамический структурный фактор, дисперсию и декремент затухания плазмонов в вырожденной подсистеме электронов [112–117].

Если в первых работах диагностические рентгеновские импульсы создавались вторичным излучением, полученным от мишеней, облученных мощными оптическими лазерами, то в последующем им на смену пришли лазеры на свободных электронах, значительно расширившие возможности диагностики [118–120].

1.1.6. Исследования водорода и дейтерия при высоких давлениях

Исследования водорода и дейтерия при высоких давлениях следует выделить в отдельный раздел. С одной стороны, эти работы имеют важные приложения в области управляемого термоядерного синтеза и описания указанных выше астрофизических объектов (см. раздел 1.1.2), а с исследованиями металлического водорода при высоких давлениях связываются надежды на получение высокотемпературной сверхпроводящей фазы. С другой стороны, эти вещества ввиду простоты их строения являются хорошей моделью для отработки и сопоставления различных теоретических подходов и методов компьютерного моделирования, в том числе, являющихся предметом настоящей работы.

Началом исследований ударно-сжатого водорода можно считать работу [121], в которой с использованием взрывчатых веществ для инициирования ударной волны было получено давление 4 ГПа при температуре 1100 К. В [122, 123] удалось достичь уже давлений 20 – 90 ГПа в жидком дейтерии при температуре до 7000 К. В [124] получены новые результаты в диапазоне давлений 2 – 76 ГПа. Ударная волна здесь создавалась в изначально жидком веществе при криогенных температурах с использованием алюминиевого ударника. С использованием этих данных и результатов [122, 123] в [124] были построены ударные адиабаты (адиабаты Гюгонию) для водорода и дейтерия при давлениях до 90 ГПа.

Дальнейшее повышение давления в ударно-волновых экспериментах потребовало разработки новых методик. Одной из них стало использование мощных лазерных импульсов, воздействующих на металлический ударник с абляционным покрытием, который затем создает ударную волну в образце. С использованием лазерных импульсов интенсивностью $10^{13} - 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² на установке “Nova”

в Ливерморской национальной лаборатории США таким способом было достигнуто давление 320 ГПа в жидком дейтерии [125, 126]. Результаты экспериментов указывали на наличие фазового перехода при давлении около 100 ГПа, который отражался на ударной адиабате в виде резкого роста сжимаемости плазмы до 5.5 – 6 раз относительно нормальной плотности дейтерия.

Аномально высокие степени сжатия, полученные в [125, 126], тем не менее, расходились с имеющимися теоретическими моделями [127] и расчетами методом КМД-КТ [128] (см. раздел 1.3.4). Верификацией этих результатов занялись различные экспериментальные группы по всему миру. Наиболее убедительные измерения, опровергающие результат [125, 126], были получены в Сайдийской национальной лаборатории США [129, 130] и в ВНИИЭФ в Сарове [131, 132].

В [129, 130] для создания ударной волны использовалась уникальная установка, получившая название “Z-machine”, в которой за счет прохождения огромного тока по массиву взрывающихся проводящих проволок создавался импульс магнитного поля, ускоряющий ударник и сжимающий образец. При скорости ударника свыше 22 км/с были достигнуты давления 400 ГПа и плотности образца более 1.5 г/см^3 . Максимальная сжимаемость дейтерия составила 4.3, а адиабата Гюгонио имела более плавную зависимость от давления, что находится в хорошем согласии с уравнением состояния SESAME [127] и результатами расчетов [128, 133, 134].

Одновременно с этим в ВНИИЭФ была разработана методика сжатия твердого дейтерия с помощью взрывчатых веществ на основе сферически сходящихся ударных волн [131, 132, 135]. Результаты этих экспериментов также подтвердили данные Сайдийской лаборатории [129, 130].

Окончательный ответ на вопрос о форме адиабаты Гюгонио и максимальной сжимаемости водорода и дейтерия был получен уже в последние годы, когда в результате экспериментов на обновленной “Z-machine” [136], а также на новой лазерной установке “Omega” [137] были выполнены прецизионные измерения при давлениях до 1000 ГПа [137]. Эти результаты подтвердили максимальную сжимаемость дейтерия 4.3 – 4.5, что согласуется с большинством уточненных теоретических моделей и результатов компьютерного моделирования. В то же время авторы [136, 137] отмечают, что в настоящий момент не существует теоретической модели, которая удовлетворительно описывала бы экспериментальные

данные во всей исследованной области параметров. Как правило, при давлениях свыше 500 ГПа эксперименты показывают более высокую степень сжатия, чем все имеющиеся результаты расчетов.

Большое количество экспериментальных и теоретических работ посвящено исследованию перехода водорода и дейтерия из состояния молекулярной в состояние атомарной жидкости при высоких давлениях, что сопровождается резким ростом проводимости вещества. Этот эффект часто называют диссоциативным или плазменным фазовым переходом [138–146]. Для наблюдаемого в экспериментальных работах скачка проводимости обычно применяется термин “металлизация”, хотя в [147] отмечается, что для возникновения металлической фазы необходимо появление соответствующей зонной структуры.

Экспериментальные свидетельства диссоциации жидкого водорода и перехода его в проводящее состояние при высоких давлениях появились еще в ранних работах по сжатию в легкогазовых пушках [148, 149]. Резкий рост проводимости дейтерия при давлениях более 50 ГПа подробно исследовался и в последующих динамических экспериментах с помощью описанных выше методик [63, 125, 126, 147, 150–155].

Результаты этих экспериментов не вполне соответствуют друг другу. Например, на “Z-machine” [153] фазовый переход регистрируется при давлениях на ~ 100 ГПа выше, чем во многих других работах. Проблемой здесь является то, что температура в динамических экспериментах, как правило, не измеряется напрямую, а рассчитывается на основе тех или иных моделей. Еще одной проблемой является различающиеся на несколько порядков времена существования ударно-сжатого вещества. Обсуждение этих различий активно ведется в литературе [154–156] и окончательная точка в этом вопросе пока еще не поставлена.

Не вполне ясным остается и характер самого фазового перехода. В одних работах приводятся аргументы в пользу фазового перехода первого рода с присущей ему областью неустойчивости и критической точкой [143, 157]. В пользу этого говорит наличие участка постоянной температуры (плато) при нагреве в статических экспериментах [155]. С другой стороны, проведенный в [158] на основе машинного обучения анализ большого объема экспериментальных и расчетных данных по скачку проводимости в жидком водороде говорит о том, что этот пере-

ход имеет скорее плавный характер, не соответствующий определению фазового перехода первого рода. В [159] утверждается, что в рассматриваемой области параметров существует по крайней мере три различных фазовых перехода, и лишь один из них связан с появлением свободных зарядов, что соответствует понятию плазменного фазового перехода.

Отдельного внимания здесь заслуживают работы по квазиизоэнтропическому сжатию вещества, получаемому с помощью последовательности прямых и отраженных ударных волн [147, 152, 160–163]. Данная методика позволяет достичь мегабарного диапазона давлений с существенно меньшим разогревом плазмы, по сравнению, например, с описанными выше лазерными экспериментами.

В [147, 152, 161] рассматривается многократное сжатие водорода, дейтерия, гелия и ксенона в плоской и цилиндрической геометрии. В [147] для всех исследованных веществ при сжатии, начиная с некоторой пороговой плотности, наблюдался резкий рост проводимости на несколько порядков. Для водорода этот рост был отмечен в области плотностей $\rho = 0.3 - 1 \text{ г/см}^3$ при температуре, не превышающей $5.3 \cdot 10^3 \text{ К}$, т.е. значительно ниже порога термической ионизации. В качестве объяснения данного эффекта рассматривалось снижение потенциала ионизации в неидеальной плазме.

В [152] был получен необычный скачок плотности на изоэнтропе дейтерия при давлении 125 – 130 ГПа, в результате которого плотность изменялась на 25 %. Указания на такое поведение изоэнтропы имеются также в некоторых теоретических работах, например, в уравнении состояния [157], основанном на квантово-статистическом подходе, расчетах методом Кара-Паринелло [141], МКИТ [164] и КМД [143] (см. описания методов в разделе 1.3). По мнению авторов указанных работ, этот результат является свидетельством плазменного фазового перехода первого рода.

Дальнейшее развитие данной экспериментальной методики привело к созданию устройств сферической геометрии, в которых были достигнуты рекордные давления и плотности для плазмы дейтерия и гелия [160, 162, 165–171]. Для диагностики такой плазмы в ВНИИЭФ была создана уникальная установка, основанная на тормозном рентгеновском излучении электронов, ускоряемых бетатронами до $\sim 60 \text{ МэВ}$. Этим способом в [160] было получено давление плазмы дейтерия

1830 ГПа, в [160] — 2210 ГПа, в [166, 167] — 5500 ГПа, в [162, 169] — 11400 ГПа, а в [171] — 20000 ГПа.

С использованием новых технических возможностей область предполагаемого фазового перехода [152] была повторно исследована с помощью устройств сферической [168] и цилиндрической [170] геометрии. Эти эксперименты подтвердили скачок плотности в диапазоне $\rho = 1.46 - 1.68 \text{ г/см}^3$ при давлении $P = 150 - 160 \text{ ГПа}$, как для чистого дейтерия, так и для смеси дейтерия с гелием. В [168] также есть указания на изменение наклона изоэнтропы при давлении более 154 ГПа, однако последующие эксперименты этого не подтвердили.

Представленные в [170, 171] новые теоретические расчеты, выполненные с помощью химической модели SAHA [168], также предсказывают скачок плотности, близкий к экспериментальному, но при давлениях около $\sim 600 \text{ ГПа}$, хорошо согласуясь при этом с экспериментом при $P < 150 \text{ ГПа}$. Расчеты методом квантовой молекулярной динамики, напротив, скачок плотности не воспроизводят, но хорошо согласуются с экспериментальными данными в области высоких давлений $P > 150 \text{ ГПа}$. При обсуждении этих различий в [170] указывается на высокую степень неопределенности температуры сжатого вещества в ударных экспериментах и необходимость развития новых экспериментальных методик для ее определения.

Не волне ясными остаются пока и положения тройных точек на фазовой диаграмме водорода и дейтерия (молекулярная жидкость – атомарная жидкость – молекулярный кристалл), а также верхней границы существования твердого металлического водорода [155, 168]. Тем не менее, вклад ударных экспериментов в исследования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества сложно переоценить.

1.1.7. Воздействие лазерных импульсов и потоков частиц на вещество

Развитие в 1980-90-х годах мощных лазеров, способных генерировать импульсы пико- и фемтосекундной длительности, сделало возможным исследование экстремальных состояний вещества, образующихся в результате воздействия лазерного излучения на твердые, газообразные и кластерные мишени [172, 173].

В настоящее время лазерная плазма, получаемая на установках петаваттного

класса, широко используется как источник рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов с высокими энергиями. Их область применения связана с рентгеновской диагностикой вещества с субпикосекундным временным разрешением (в том числе распространения ударных волн), инициированием ядерных реакций, управляемым термоядерным синтезом, ядерной фотоникой, медицинскими приложениями (см., например, [174–178] и ссылки в указанных статьях).

При воздействии лазерного импульса на газовую мишень первичное поглощение излучения происходит на всей длине мишени, а при воздействии на металлическую мишень — в приповерхностном слое. За счет высокой интенсивности поля световой волны и многофотонного поглощения происходит быстрая первичная ионизация отдельных атомов или электронов проводимости [179], причем воздействие на твердотельные мишени фемтосекундных импульсов не приводит к образованию приповерхностного плазменного слоя, как это наблюдалось для импульсов большей длительности [180].

Ускоренные в поле лазерной волны первичные электроны испытывают столкновения с другими атомами мишени и также ионизуют их, что в конечном итоге создает “лазерную плазму”. При интенсивностях излучения более 10^{15} Вт/см² и относительно пологом профиле плотности плазмы более эффективным становится механизм резонансного поглощения, при котором на границе критической плотности плазмы $\omega \approx \omega_p$ возбуждается плазменная волна, распространяющаяся вглубь вещества и передающая ему энергию импульса [181, 182]. При резкой границе плазмы либо при еще более высокой интенсивности импульса доминирует механизм вакуумного нагрева, при котором электроны, вылетая с поверхности, ускоряются на полупериоде колебаний светового поля и возвращаются в вещество мишени с большей энергией [183–185].

При высоких интенсивностях лазерных импульсов $I \geq 10^{15}$ Вт/см² образующаяся плазма хорошо описывается бесстолкновительной моделью, а для ее моделирования, как правило, применяются гидродинамические подходы или метод частиц в ячейке (см. раздел 1.3.3). Неидеальная плазма может быть получена при облучении твердотельных мишеней импульсом умеренной интенсивности $I = 10^{12} - 10^{15}$ Вт/см² [184, 186–190] или в результате воздействия на вещество

предимпульса к основному импульсу более высокой интенсивности [191, 192]. В большинстве указанных здесь работ исследуется неравновесное состояние неидеальной плазмы после ее возникновения. В отличие от плазмы на фронте ударной волны, где энергия волны передается в первую очередь ионной подсистеме, а температура частично вырожденной плазмы электронов остается достаточно низкой, в случае лазерной плазмы основной нагрев испытывают электроны, которые затем расходуют свою энергию на плавление ионной решетки (для твердых тел) и нагрев ионов за счет столкновений [179]. Одновременно с этим происходит частичный вылет электронов из вещества мишени, формирование двойного электронного слоя на границе плазмы, а на больших временах — расширение ионной подсистемы и разлет плазмы. Часть энергии при этом тратится на излучение и генерацию высокоэнергетических частиц.

Таким образом, особенностью теоретического исследования лазерной плазмы является необходимость учета большого числа одновременно происходящих процессов, включая электрон–ионную релаксацию. При этом, например, установление локального равновесия в электронной подсистеме происходит фемтосекундным, а электрон–ионная релаксация, плавление ионной решетки и разлет плазмы — на пикосекундных временных масштабах [186].

Другой проблемой построения теоретических моделей неидеальной лазерной плазмы является широкий диапазон изменения параметров вещества в процессе релаксации (температур электронов и ионов, среднего заряда ионов, плотности плазмы, параметров неидеальности и вырождения для электронов). Например, в [187] показана зависимость этих параметров от пространственной координаты, направленной вглубь мишени. Видно, что параметры Γ и θ меняются в очень широких пределах, поэтому теоретическая модель должна включать в себя выражения для частоты электрон–ионных столкновений, теплопроводности, диэлектрической проницаемости, коэффициентов поглощения лазерного излучения и радиационных потерь, а также уравнений состояния (внутренней энергии и давления) в диапазоне от вырожденной металлической до слабонеидеальной газовой плазмы.

С учетом этих особенностей в серии работ [187, 188, 191, 193, 194] была предложена двухтемпературная гидродинамическая модель, включающая процессы ионизации и распространения лазерного импульса, которая позволила описать

абляцию и излучение в тонких пленках и других твердотельных мишенях, облученных короткими лазерными импульсами. Данная модель опирается на широкодиапазонные уравнения состояния [195, 196]. Для описания свойств плазмы в малоисследованных областях параметров используется интерполяция частоты электрон–ионных столкновений и других величин, идея которой была высказана в более ранних работах [197]. Альтернативная модель столкновительного затухания, основанная на квантово-статистическом подходе, представлена в [198].

Попытка экспериментального определения скорости электрон–ионной релаксации в неидеальной лазерной плазме была предпринята в [199], где газовая струя SF_6 облучалась импульсом с длительностью 10 пс и энергией порядка 1 Дж. Первоначально электроны нагревались до температуры $T_e \approx 100$ эВ, при холодных ионах. На временах около 200 фс происходил нагрев ионов, связанный с их разупорядочением (disorder induced heating), после чего наступала фаза электрон–ионной релаксации. Использование томпсоновского рассеяния и доплеровского уширения спектров поглощения позволило оценить изменение температур электронов и ионов на временах порядка 200 пс. Однако, результаты этого эксперимента, а также проведенного позже компьютерного моделирования [200] не позволили прояснить механизм релаксационных процессов.

Поскольку поглощение лазерного излучения в твердотельных мишенях происходит в приповерхностном слое, использование пространственно-неоднородных мишеней: пористых сред [201–204], поверхностей с напыленными наночастицами [205–207] и наностолбиками [208–210], а также других типов наноструктурированных мишеней [211, 212], повышает эффективную площадь поверхности и, соответственно, увеличивает эффективность поглощения света.

Еще больший энерговклад достигается при воздействии лазерного излучения на поток атомарных или металлических кластеров нанометрового размера (нанокластеров). Нагрев частиц в этом случае увеличивается из-за более медленного отвода тепла, при том, что средняя плотность вещества в потоке кластеров превышает таковую для газовой плазмы [213–215]. Эти свойства кластеров впервые были экспериментально подтверждены в работах [216, 217], где исследовалась генерация рентгеновского излучения при воздействии импульсов субпикосекундной длительности и интенсивности $I = (10^{17} - 10^{19})$ Вт/см² на кластеры криптона

и ксенона.

Более подробное исследование плазмы, образующейся при облучении кластеров из атомов инертных газов нанометрового размера (наноплазмы), было проведено в серии работ [218–221], где были рассмотрены процессы ионизации, нагрева и термализации электронов, а также разлета ионов за счет кулоновского отталкивания, получившего название “кулоновский взрыв”. В качестве основных механизмов нагрева электронов отмечены эффекты надбарьерной ионизации и обратного тормозного рассеяния при столкновении электронов с ионами. При интенсивности лазерного излучения более 10^{16} Вт/см² наблюдался выход горячих электронов с энергиями 1 КэВ и выше, а также ионов с энергиями до 1 МэВ.

В [220] для исследования динамики наноплазмы была применена модифицированная методика “pump-probe”, в которой вслед за ионизирующим (pump) импульсом длительностью 50–5000 фс с контролируемой задержкой следовал диагностический (probe) импульс, который в отличие от традиционной схемы “pump-probe” имел в 10 раз большую интенсивность, чем ионизирующий импульс. Пиковые интенсивности первого и второго импульсов составляли порядка 10^{16} и 10^{17} Вт/см², соответственно. В результате был обнаружен максимум поглощения второго импульса при задержке между импульсами порядка 1 пс. Это указывает на наличие еще одного механизма поглощения лазерного излучения, связанного с резонансом между частотой светового поля и коллективными колебаниями электронов в кластере.

Резонанс в наноплазме возникает при достижении кластером определенного размера в процессе разлета ионов и изменения плотности плазмы, влияющей на частоту колебаний электронного облака. Другие способы экспериментального исследования резонансного поглощения основаны на варьировании длительности основного лазерного импульса [222] или наблюдении изменения поляризуемости кластерной среды при переходе электронной плотности через значение критической плотности [223]. Позднее эффект резонансного поглощения подробно исследовался, например, для наноразмерных капель гелия, допированных атомами инертного газа [224–226].

Для теоретического описания резонансного поглощения короткого импульса в кластерной наноплазме необходимо знать спектр электронных колебаний при

определенном размере кластера (этот вопрос подробно обсуждается в главе 4) и динамику разлета ионов после ионизации. Экспериментальное исследование разлета ионов выполнено, например, в [221], где были получены зависимости максимальной энергии вылетающих ионов от исходного размера кластера и интенсивности лазерного излучения.

Механизмы поглощения лазерного излучения, ионизации, нагрева и кулоновского взрыва нанокластеров обсуждается в ряде теоретических работ [213–215, 227–230] и работ по компьютерному моделированию (см. разделы 1.3.2 и 1.3.3). Примерами практического применения кластерной наноплазмы могут служить источники высокоэнергетичных электронов [231, 232], протонов [233], многозарядных ионов [234, 235], нейтронов [236] и рентгеновского излучения [237].

Эффекты неидеальности в кластерной наноплазме, как и в случае с объемными мишенями, проявляются при умеренной интенсивности лазерных импульсов $I = 10^{12} - 10^{15}$ Вт/см². В серии работ [238–243] рассматривается облучение такими импульсами металлических кластеров свинца, платины, серебра и натрия.

Особенностью облучения металлических мишеней является их высокая степень ионизации при относительно небольшой интенсивности импульса. Например, в [239] при $I = 1.2 \cdot 10^{15}$ Вт/см² наблюдался вылет ионов свинца с зарядом до $Z = 28$. Зависимость спектра зарядовых состояний ионов от параметров облучения позволила сделать вывод об эффективности поглощения света. В [243] также исследовалось угловое распределение вылетающих ионов при различной поляризации лазера. Во всех указанных работах использовалась описанная выше методика “pump-probe”, которая показала наличие выраженного резонансного поглощения. Так в [242] наблюдалось 10-тикратное увеличение выхода ионов Ag^{10+} при задержке между импульсами около 5 фс. В этой работе отмечается также, что максимальная энергия вылетающих электронов в 80-180 раз превышает энергию ponderomotorных сил, что говорит о большой роли резонансного поглощения и релаксационных процессов в наноплазме.

Изначально экспериментальная техника не позволяла непосредственно наблюдать процессы в кластерной наноплазме, и их анализ основывался на косвенных измерениях излучения плазмы и вылетающих из нее заряженных частиц, а также на результатах компьютерного моделирования (см. раздел 1.3). Однако, в

последнее время такие наблюдения стали возможными. Например, в [244] исследуется возникновение в 100 нм кластере ударной волны при облучении его 40 фс лазерными импульсами. В [245, 246] на основе дифракции рентгеновских импульсов с энергией 800 эВ и длительностью 40 – 50 фс удалось наблюдать эволюцию распределения плотности наноплазмы в процессе ее расширения. Данные результаты были получены для кластеров Хе [245] и SiO₂ [246], облученных импульсами с интенсивностью $10^{14} - 10^{15}$ Вт/см². Результаты [246] находятся в хорошем согласии с проведенным ранее моделированием для кластеров водорода [247], однако многие вопросы динамики электронов в нанокластерах остаются пока изученными не до конца.

В заключение данного раздела рассмотрим эксперименты, в которых разогретое плотное вещество генерировалось под воздействием потоков заряженных частиц на твердотельные мишени. Потоки таких частиц могут генерироваться как с помощью лазерной плазмы, так и в ускорителях.

Воздействие потока протонов, генерируемых лазерной плазмой, на металлические мишени обеспечивает изохорический нагрев вещества до температур в 1 – 40 эВ за времена порядка десятков пикосекунд при сохранении твердотельной или более высокой плотности [248–250]. В [251], однако, указывается что данная методика часто приводит к неоднородности нагрева мишени вследствие большого выделения энергии на пике Брэгга. Удовлетворительная пространственная однородность плазмы была получена в [252], где для нагрева пленок золота и алмаза использовался поток ионов алюминия с энергией 200 – 300 МэВ и длительностью ~ 20 пс. В результате температура мишени достигала 1.7 – 5 эВ при твердотельной плотности. Экспериментально регистрировался спектр вторичных ионов и расширение плазмы. Для оценки состояния вещества привлекалась модель SESAME и другие теоретические модели, описывающие торможение ионов в среде, электрон–ионную релаксацию и др., что говорит о важности развития этих моделей.

Большой прогресс в методах генерации и исследования разогретого плотного вещества с помощью ускорителей протонов и тяжелых ионов был получен на установках в GSI и CERN [253–256]. В [255], например, рассматривается неидеальная плазма, возникающая при воздействии потока протонов Большого адронного кол-

лайдера (LHC) с энергией до 362 МДж на медную или графитовую мишени, что связано с моделированием аварийных ситуаций на этой установке. В [256] описана постановка эксперимента по генерации неидеальной плазмы с помощью потока ионов урана на установке FAIR.

Интересным примером наноплазмы является также вещество внутри трека тяжелого иона, воздействие которого на конденсированную мишень создает цилиндрический слой ионизированных атомов [257–259]. Релаксация и излучение такой плазмы рассматриваются в разделе 3.3.

1.1.8. Ультрахолодная плазма

Как было отмечено ранее, область существования равновесной электрон–ионной плазмы ограничивается температурами порядка 10^3 К, поскольку при более низких температурах происходит рекомбинация электронов и ионов. Однако, в области очень низких температур возможно создание метастабильной плазмы, в которой процесс тройной рекомбинации затрагивает ридберговские состояния и происходит на достаточно длительных временах (0.1 – 1 мкс). Создание такой плазмы, получившей название “ультрахолодной”, стало возможным благодаря появлению методики лазерного охлаждения и возможности удерживать атомы и ионы в магнитооптической, дипольной или магнитной ловушках.

В одной из первых экспериментальных работ [260] исследовалась система из нескольких миллионов атомов ксенона при концентрации $2 \cdot 10^{10}$ см⁻³, охлажденных до температуры 10^{-5} К. Охлажденные атомы находились на уровне $6p[5/2]_3$, с которого затем осуществлялась фотоионизация. Варьированием длины волны лазерного излучения, использовавшегося для фотоионизации, удавалось получить электроны с температурами в диапазоне $T_e = 0.1 - 1000$ К.

Из рис. 1.1 видно, что при уменьшении температуры разница концентраций между границами вырождения $\theta = 1$ и неидеальности $\Gamma = 1$ увеличивается. При температуре электронов $T_e = 0.1$ К и наибольшей полученной в эксперименте [260] концентрации заряженных частиц $n_e = 2 \cdot 10^9$ см⁻³ параметр неидеальности для электронов достигает значения $\Gamma = 27$ (авторы [260] заявляют о достижении значения $\Gamma = 10$). Таким образом, ультрахолодная плазмы позволяет

исследовать системы с гораздо большей степенью неидеальности, чем обычная (горячая) плазма, в которой рост неидеальности с увеличением плотности ограничен вырождением электронного газа. Параметр неидеальности для ионов при этом на несколько порядков выше из-за их более низкой температуры $T_i = 10^{-4} - 10^{-3}$ К.

В [261] исследовался процесс расширения ультрахолодной плазмы, а также возбуждения в ней плазменных колебаний посредством радиочастотных импульсов. Определение резонансной частоты плазменных колебаний позволило уточнить значения концентраций электронов и ионов.

Авторы [260] отмечают, что в соответствии с теорией трехчастичной рекомбинации, которая рассматривается как доминирующий механизм уменьшения концентрации электронов, время существования заряженных частиц при указанных выше условиях должно составлять несколько наносекунд. Однако, в эксперименте время жизни ультрахолодной плазмы достигало 100 мкс, что говорит об ином механизме рекомбинации. Более подробно этот вопрос изучался в работе [262], где рассматривалась рекомбинация электронов с формированием ридберговских атомов, имеющих значение главного квантового числа 55 – 100. Эта работа также подтвердила существенное замедление трехчастичной рекомбинации по сравнению с имеющимися теоретическими моделями.

Установление равновесия в ультрахолодной плазме сразу после ионизации рассмотрено в [263], где был выявлен немонотонный характер изменения температуры ионов со временем. При этом изменение температуры электронов путем подстройки частоты фотоионизационного лазера позволило варьировать радиус экранирования ионов электронами и, таким образом, воздействовать на эффективный потенциал ион–ионного взаимодействия, получая данные о влиянии этого потенциала на динамику ионной подсистемы.

Обзор экспериментальных методов получения ультрахолодной плазмы и теоретических моделей для ее описания приведен в [34]. В данной работе отмечается, что большое время жизни заряженных частиц (100 мкс) одновременно с быстрым установлением максвелловского распределения для электронов и относительно медленной электрон–ионной релаксацией температур, позволяет рассматривать ультрахолодную плазму как квазиравновесную и исследовать, например, процессы коллективных колебаний электронов.

Прямые измерения рекомбинационной флюоресценции в ультрахолодной плазме удалось выполнить в [264]. Для диагностики использовался переход между ридберговскими уровнями $4s6f$ и $3d4s$ в ионах кальция. Изменения проводились с субмикросекундным временным разрешением. В результате было показано, что при относительно высоких температурах электронов ($T_e > 7$ К) частота рекомбинации растет пропорционально n_e^3 в соответствии с классической теорией, однако при более низких температурах этот закон меняется на $n_e^{2.2}$. В данной работе показана также существенная роль нагрева, связанного с установлением корреляций в электронной подсистеме сразу после ионизации (disorder induced heating), особенно при низких температурах плазмы. Например, при начальной температуре $T_e = 0.5$ К за время порядка одного плазменного периода (< 1 нс) температура возрастает до 5 К.

В [265] исследуется возбуждение ионно-звуковых волн в ультрахолодной плазме. Показано, что их дисперсия соответствует теории идеальной плазмы, а затухание существенно превышает результат [89].

Метод прямого измерения автокорреляционной функции скоростей ионов предложен в [266], где наблюдалась релаксация скоростей для части помеченных ионов. Затухание автокоррелятора от времени содержит неэкспоненциальный (кинетический) участок, что качественно согласуется с неэкспоненциальной стадией электрон–ионной релаксации [95]. На основе автокоррелятора скорости получены значения коэффициента диффузии ионов, которые для параметра неидеальности $\Gamma > 0.5$ заметно отклоняются от теории Ландау–Спитцера, однако находятся в хорошем согласии с результатами моделирования (см. раздел 1.3.2).

Исследования ультрахолодной плазмы внесли значительный вклад в развитие теории неидеальной плазмы, в первую очередь, за счет относительной простоты генерации плазмы и измерения ее характеристик (по сравнению, например, с взрывными экспериментами). Они также позволили исследовать область параметров неидеальности $\Gamma > 4$, недостижимую для обычной электрон–ионной плазмы.

1.2. Теоретические исследования неидеальной электрон–ионной плазмы

1.2.1. Квантово-статистический подход для расчета термодинамических свойств неидеальной плазмы

Обсуждая теоретические исследования плазменных сред, нельзя не упомянуть основополагающую работу Дебая и Хюккеля [267], в которой был оценен эффект экранирования и получено выражение для потенциала заряженной частицы в плазме с учетом первого приближения по взаимодействию в форме $\phi(r) \sim \exp(-r/r_D)/r$.

Важность этого результата заключается, в первую очередь, в том, что учет дебаевского экранирования позволяет решить проблему вычисления первой поправки по взаимодействию для основных термодинамических функций, так как для исходного кулоновского потенциала соответствующий интеграл расходится [268]. Выражения для этой поправки удобно представить в зависимости от плазменного параметра, называемого также классическим параметром взаимодействия,

$$\Gamma_D = \frac{e^2}{r_D k_B T} = \frac{1}{6N_D} = \sqrt{6} \Gamma^{3/2}. \quad (1.7)$$

В этом случае поправки на взаимодействие к свободной энергии ΔF , давлению Δp и химическому потенциалу для ионов $\Delta \mu_i$ имеют вид [33, 269]:

$$\frac{\Delta F}{N_e k_B T_e} = -\frac{\Gamma_D Z^2}{3}, \quad \frac{\Delta p}{n_e k_B T_e} = -\frac{\Gamma_D Z^2}{6}, \quad \frac{\Delta \mu_i}{k_B T_e} = -\frac{\Gamma_D Z^2}{2}. \quad (1.8)$$

Здесь следует уточнить определения, так как идеальным газом обычно считается система, в которой можно полностью пренебречь взаимодействием частиц между собой. Такое определение оправдано для газа нейтральных атомов или молекул с короткодействующим потенциалом взаимодействия, однако для плазмы оно, очевидно, бессмысленно, так как любые плазменные эффекты основаны на взаимодействии зарядов. Поэтому для плазмы понятие неидеальности обычно вводится через отношение средней потенциальной энергии взаимодействия за-

рядов к кинетической Γ , плазменный параметр Γ_D или среднее число частиц в сфере Дебая N_D . В этом смысле плазму, удовлетворяющую условиям приближения Дебая-Хюккеля $\Gamma \ll 1$, $\Gamma_D \ll 1$, $N_D \gg 1$, мы будем называть идеальной или дебаевской.

Общая теория неидеальных газов, позволяющая, в частности, рассчитать первый коэффициент вириального разложения по плотности для произвольного парного потенциала взаимодействия, была развита в работах Бета и Уленбека [270, 271]. Достижением этих работ является отдельный учет непрерывного и дискретного спектра состояний, а также метод расчета квантово-механических поправок по взаимодействию с использованием как классического распределения Больцмана, так и распределений Ферми или Бозе.

Работы Бета и Уленбека заложили основу квантовой статистики, аппарат которой был применен впоследствии и для систем заряженных частиц. В частности, этот подход получил свое развитие в работах Веденова и Ларкина [272, 273] в применении к электрон-ионной плазме. При этом в [272] отмечается, что стандартное вириальное разложение по целым степеням плотности неприменимо для систем с медленно затухающим кулоновским потенциалом, так как первый и второй вириальные коэффициенты, пропорциональные n_e и n_e^2 , не описывают эффекты парного взаимодействия зарядов. Действительно, как видно из (1.8), первая поправка на взаимодействие для давления в дебаевской плазме пропорциональна $\Delta p \sim n_e^{3/2}$. В результате авторами [272] было получено выражение для свободной энергии в виде $F = F_{\text{ideal}} + An^{3/2} + Bn^2 \ln n + Cn^2$, где n — концентрация зарядов, а A , B и C — коэффициенты разложения, первый из которых соответствует приближению Дебая-Хюккеля.

В работе [273] получен важный результат для низкотемпературной плазмы, т.е. плазмы с температурой электронов $k_B T_e \ll I$, где $I = Z^2 E_h / 2$ — потенциал ионизации основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра Z , $E_h = e^4 m_e / \hbar^2$ — энергия Хартри. В этой области, как было указано выше, при расчете статистической суммы существенным становится учет связанных состояний электронов и ионов. В то же время хорошо известно, что статистическая

сумма изолированного водородоподобного атома расходится

$$\sigma(T_e) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k \exp(-\beta E_k), \quad (1.9)$$

где $E_k = -I/k^2$ — энергия уровня с главным квантовым числом k , а $g_k = k^2$ — статистический вес уровня, обусловленный вырождением по орбитальному и магнитному квантовым числам.

Решением этой проблемы может быть совместный учет связанных и свободных состояний, при котором статистическая сумма высоколежащих связанных состояний и свободных состояний (состояний рассеяния) оказывается конечной. Для суммы низколежащих состояний в этом случае также получается сходящийся результат

$$\sigma_{\text{PL}}(T_e) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k [\exp(-\beta E_k) - 1 + \beta E_k]. \quad (1.10)$$

Полученное выражение получило известность как статистическая сумма Планка–Ларкина. Его более строгое обоснование получено уже в более поздних работах [28, 33].

Несколько иной подход предлагается в работе [274], где статистическая сумма по связанным состояниям дискретного спектра ограничивается энергией $\varepsilon_b = -e^2/r_0$, где r_0 — расстояние до ближайшей частицы противоположного знака, а статистическая сумма оставшихся классических свободных состояний рассчитывается с помощью метода групповых разложений.

Дополнительное уточнение статистических сумм (1.9) – (1.10) может быть получено также за счет рассмотрения спектра электронных состояний не в кулоновском, а в дебаевском потенциале взаимодействия с учетом экранирования, хотя в [275] и других работах этот способ расчета статистической суммы подвергается критике.

Другие варианты ограничения статистической суммы атома включают в себя учет снижения потенциала ионизации за счет перекрытия “кулоновских воронок” от соседних атомов и уширение электронных уровней вследствие эффекта Штарка, вызванного влиянием микрополей плазмы. Обсуждение этих подходов

приведено, например, в [276].

Ограничение применимости выражения (1.10) проявляется при возрастании параметра неидеальности плазмы из-за того, что статистическая сумма Планка–Ларкина не содержит явной зависимости от плотности плазмы. Уточнения этой формулы рассматриваются в работах [138, 277], включая поправки на обменное взаимодействие для электронов, квантовые поправки следующего порядка, учет экранирования и др. При этом регуляризация статистической суммы, по мнению авторов [138, 277], не требует явного учета дебаевского экранирования, тогда как в работах [28, 33], напротив, экранирование зарядов рассматривается в качестве обоснования формулы Планка–Ларкина. Несмотря на разность подходов, полученные результаты в достаточной степени близки друг к другу [277]. Обзор различных подходов к решению данной проблемы приведен в [35].

Оригинальная модель учета эффектов неидеальности в рамках подхода Бете–Уленбека предложена в работе [278]. На ее основе определено выражение для большого термодинамического потенциала, включающее взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме с учетом заряд–дипольного и заряд–квадрупольного взаимодействий. Эта модель оказалась полезной для создания так называемой химической модели плазмы, описанной ниже в разделе 1.2.3.

Одна из возможностей дальнейшего развития квантово-статистического подхода связана с использованием приведенных матриц плотности и аппарата функций Грина, заимствованного из квантовой теории поля, который в то же время позволяет получить решение и ряда задач физики неидеальной плазмы. Этот подход изложен в ряде монографий [28, 29, 33].

На основе этого подхода и теории линейного отклика были получены выражения для диэлектрической проницаемости слабонеидеальной плазмы в борновском приближении [279], а также динамической частоты электрон–ионных столкновений, динамической проводимости слабонеидеальной водородной плазмы и динамического структурного фактора с учетом сильных столкновений (за пределами борновского приближения) и динамического экранирования [280–282, 282–284].

В [285] представлена интерполяционная формула для статической проводимости полностью ионизованной плазмы, полученная на основе различных квантово-статистических подходов. Эта формула применима в широком диапазоне

плотностей и температур, включая область вырожденной плазмы (но не включая частично ионизованную плазму). Применение этого подхода для описания ударно-сжатой плазмы ксенона (см. раздел 1.1.5) изложено в [94]. Обзор полученных результатов и их сравнение с различными численными моделями представлен в [286]. Дополнительно в [287] показано влияние на проводимость электрон-электронных столкновений при различной степени вырождения электронов. Другие методы расчета статической проводимости неидеальной плазмы обсуждаются в работах в [288–294], а также в главе 2.

Следует также отметить серию работ [198, 295, 296], в которых на основе квантового кинетического уравнения рассматривается нелинейное поглощение лазерного излучения в неидеальной плазме. Столкновения частиц рассчитываются в борновском приближении с учетом динамического экранирования

Как было отмечено выше при больших концентрациях электронов ($r_s \gtrsim 1$) и температурах, не превышающих энергию Ферми $k_B T < E_F$, происходит перекрытие электронных оболочек ионов и вырождение электронной компоненты, поэтому вещество можно рассматривать как систему положительно заряженных ионов на однородном отрицательно заряженном фоне. При условии $\Lambda_e^{-3} < n < \Lambda_i^{-3}$ ионы можно считать классическими, а электроны полностью вырожденными. Такая модель получила название однокомпонентной плазмы (one-component plasma, ОСП). Ее теоретический анализ оказывается гораздо более простым, чем в случае двухкомпонентной плазмы, так как исчезает проблема расходимости интегралов на близких расстояниях и учета связанных состояний электронов и ионов.

Обзор результатов для однокомпонентной плазмы, полученных, в том числе, с помощью компьютерного моделирования, приведен в [297, 298]. Наибольший интерес в ней представляет появление дальнего порядка при увеличении параметра неидеальности и образование объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетки для ионов. Этот процесс принято называть вигнеровской кристаллизацией. Он имеет важное значение, например, при исследовании металлизации водорода. Более подробно эти результаты обсуждаются в разделе 1.3.1.

Обратная ситуация возникает в полупроводниках, где ионную решетку можно считать практически идеальной и интерес представляет динамика электронов в зоне проводимости (классических квазичастиц с приведенной массой) на фоне

нейтрализующего положительного заряда [33]. Эта система во многом эквивалентна упомянутой выше однокомпонентной плазме ионов.

1.2.2. Модели взаимодействия частиц на основе псевдопотенциалов

Аппарат квантово-статистической теории является достаточно трудоемким, и его применение не всегда оправдано, особенно при относительно высоких температурах плазмы. В то же время при использовании методов классической статистической механики серьезной проблемой является расходимость кулоновского потенциала в нуле. Как отмечается в [29, 299], строгая статистическая теория классических материальных точек с разноименными зарядами, вообще говоря, не может быть построена.

Однако, эта задача может быть решена, если заменить расходящийся кулоновский потенциал на подходящий псевдопотенциал, конечный в нуле, который обеспечивал бы учет эффектов квантовой дифракции для электрон–ионного и электрон–электронного рассеяния при малых прицельных параметрах. Это позволит использовать аппарат классической статистической механики для расчета уравнения состояния неидеальной плазмы вплоть до границы вырождения электронов.

Такой подход был предложен в работе Кельбга [300], в которой описана следующая форма псевдопотенциала, зависящего от температуры

$$V_{cd}^{\text{Kelbg}}(r) = \frac{q_c q_d}{r} F\left(\frac{r}{\lambda_{cd}}\right),$$

$$F(x) = 1 - \exp(-x^2) + \sqrt{\pi}x(1 - \text{erf}(x)), \quad (1.11)$$

где $c = i, d = e$ для электрон–ионного и $c = d = e$ для электрон–электронного взаимодействий, $q_e = -e$, $q_i = Ze$, $\lambda_{cd} = \hbar/(2m_{cd}k_B T_e)^{1/2}$ — величина, порядка тепловой длины волны де Бройля, $m_{cd} = (1/m_c + 1/m_d)^{-1}$ — приведенная масса, $\text{erf}(x)$ — функция ошибок

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (1.12)$$

С учетом $m_i \gg m_e$, получим $\lambda_{ee} = \lambda_e/(2\pi)^{1/2}$, $\lambda_{ei} \approx \lambda_{ee}/2$. Потенциал Кельбга имеет конечное значение в нуле $V_{cd}^{\text{Kelbg}}(r \rightarrow 0) = q_c q_d \sqrt{\pi}/\lambda_{cd}$. При высоких температурах или малых значениях λ_{cd} потенциал (1.11) переходит в кулоновский

$$V_{cd}^{\text{Coul}}(r) = \frac{q_c q_d}{r}. \quad (1.13)$$

С помощью данного подхода в [300] была определена статистическая сумма и свободная энергия неидеальной электрон–ионной плазмы, выраженная через гипергеометрические функции, а также приведено простое интерполяционное выражение с числовыми коэффициентами для зависимости давления от температуры и плотности.

Поскольку расчеты с псевдопотенциалом (1.11) оказались достаточно трудоемки, в [300] в качестве более простой альтернативы рассмотрена также модель потенциала

$$V_{cd}^{\text{DH}}(r) = \frac{q_c q_d}{r} (1 - e^{-\alpha r}), \quad (1.14)$$

аналогичной той, которая используется при выводе термодинамических функций в приближении Дебая–Хюккеля. Потенциалы (1.11) и (1.14) имеют схожую форму. При $\alpha = \sqrt{\pi}/\lambda_{cd}$ их предел в нуле совпадает, а для $r > 0$ их разность не превышает 10 %.

В работе Дойча [301] предложена та же упрощенная форма потенциала электрон–ионного взаимодействия (1.14), но со значением параметра $\alpha = 1/\lambda_{ei}$. В качестве области применимости в [301] указаны температуры плазмы $T > 1\text{Ry}/k_B = 1.58 \cdot 10^5$ К, в связи с чем данный потенциал часто называют высокотемпературным, хотя фактическая область его применимости, по-видимому, гораздо шире. Сравнение различных псевдопотенциальных моделей приведено на рис. 1.2.

В дальнейшем потенциал (1.14) для электрон–электронного взаимодействия был дополнен еще одним членом, приближенно учитывающим антисимметрию волновой функции двух электронов на близких расстояниях, т.е. их эффективное отталкивание вследствие принципа Паули [302, 303]:

$$V_{ee}^{\text{Deu}}(r) = \frac{e^2}{r} \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{\lambda_{ee}}\right) \right] + k_B T \ln 2 \exp\left(-\frac{r^2}{\pi \ln 2 \lambda_{ee}^2}\right), \quad (1.15)$$

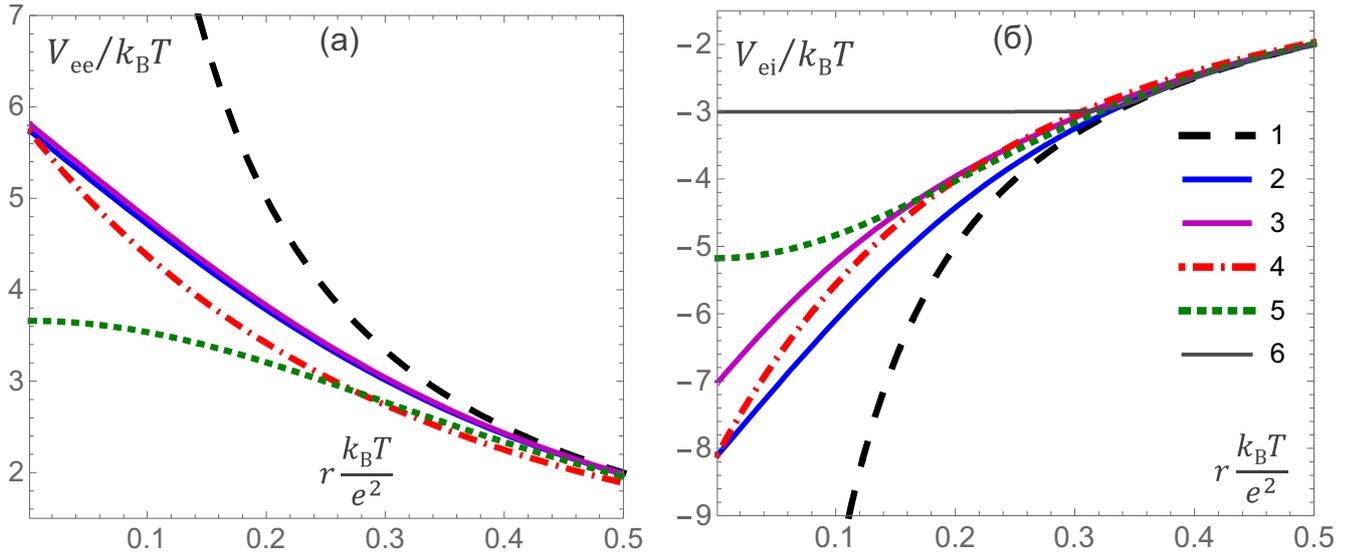


Рис. 1.2. Потенциалы электрон–электронного (а) и электрон–ионного (б) взаимодействия: 1 — кулоновский, 2 — потенциал Кельбга (1.11), 3 — потенциал Кельбга с поправками (1.18), 4 — потенциал Дойча (1.14), 5 — потенциал в форме функции ошибок (1.20), 6 — потенциал с отсечкой на уровне $-3k_B T$ (1.17). Потенциалы 2, 3, 4, 6 приведены для температуры $T = 3 \cdot 10^4$ К.

где $\lambda_{ee} = \lambda_{ee}/\sqrt{\pi} = \lambda_e/(\pi\sqrt{2})$.

Еще более сложная форма псевдопотенциала, включающая учет связанных состояний, эффектов антисимметризации и асимптотики при высоких температурах, представлена в [304]. Этот потенциал не имеет простой аналитической формы и описывается набором сходящихся рядов, коэффициенты для которых представлены в указанной работе. Показано, что в высокотемпературном пределе он совпадает с потенциалом Кельбга (1.11).

Одним из способов систематического построения псевдопотенциалов является расчет суммы Слэтера в парном приближении, определяющей вероятность обнаружения двух частиц на расстоянии r . Эта величина в состоянии термодинамического равновесия при температуре T может быть выражена и для классической, и для квантовой системы:

$$S_{cd}(r) = \lambda_{cd}^3 \sum_n \exp(-\beta E_n) |\Psi_n(r)|^2 = \exp(-\beta V_{cd}(r, T)), \quad (1.16)$$

где E_n и Ψ_n — энергии и собственные волновые функции квантовой системы из двух частиц сорта c и d , определяемые на основе более точных квантово-статистических подходов, а $V_{cd}(r)$ — искомый псевдопотенциал. Суммирование в (1.16)

может выполняться как по связанным и свободным состояниям, так и только по свободным состояниям (состояниям рассеяния). В последнем случае сумма заменяется интегралом.

В [305] представлены полученным таким способом таблицы для псевдопотенцилов электрон–электронного V_{ee} и электрон–ионного взаимодействий V_{ei} . Для V_{ei} рассматриваются свободные и связанные состояния со сдвигом по энергии на $2rZ/(na_B)$, а для V_{ee} рассматриваются свободные состояния электронов с различной комбинацией проекций спина.

В [306] рассматривается аналогичный подход с использованием статистической суммы Планка–Ларкина для электрон–ионного взаимодействия. На основе построенных псевдопотенциалов делается вывод о слабой зависимости V_{ei} от расстояния при малых r . В результате для расчетов методом Монте-Карло (см. раздел 1.3.1) предлагается достаточно простая модель потенциала с отсечкой на расстоянии r_b :

$$V_{ei}^{\text{cut}}(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > r_b, \\ -Ze^2/r_b, & r \leq r_b. \end{cases} \quad (1.17)$$

В этом случае электроны и ионы с потенциальной энергией связи менее $\epsilon_b = Ze^2/r_b$ не взаимодействуют. Взаимодействие электронов считается кулоновским. Одним из достоинств этой модели является ее вычислительная простота, что было особенно важно для расчетов на ЭВМ 1970-х годов. Тем не менее, эта модель может быть вполне оправдана при высоких температурах ($T > 3 \cdot 10^4$ К), где доля связанных состояний электронов и ионов мала. При использовании ее для молекулярно-динамического моделирования необходимо сглаживание потенциала в окрестности $r = r_b$.

В [307] псевдопотенциал, рассчитанный на основе суммы Слэтера, аппроксимируется потенциалом Кельбга, в котором добавлен зависящий от температуры параметр \tilde{A}_{cd} :

$$V_{cd}^{\text{CKelbg}}(r) = \frac{q_c q_d}{r} \left[F\left(\frac{r}{\lambda_{cd}}\right) - r \frac{k_B T}{q_c q_d} \tilde{A}_{cd}(\xi_{cd}) \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda_{cd}^2}\right) \right], \quad (1.18)$$

где $\xi_{cd} = -(q_c q_d)/(k_B T \lambda_{cd})$. Коэффициенты \tilde{A}_{cd} выбираются таким образом, чтобы значение $S_{cd}(r = 0)$ и первая производная $S'_{cd}(r = 0)$, совпадали с решением

квантово-механической задачи для соответствующей пары частиц в состоянии рассеяния (связанные состояния не учитываются). Приведенное в [307] выражение для коэффициентов \tilde{A}_{cd} имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ee}(\xi_{ee}) &= \sqrt{\pi}|\xi_{ee}| + \ln \left[2\sqrt{\pi}|\xi_{ee}| \int_0^{\infty} \frac{y \exp(-y^2) dy}{\exp(\pi|\xi_{ee}|/y) - 1} \right], \\ \tilde{A}_{ei}(\xi_{ei}) &= -\sqrt{\pi}\xi_{ei} + \ln \left[\sqrt{\pi}\xi_{ie}^3 \left(\zeta(3) + \frac{1}{4}\zeta(5)\xi_{ie}^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + 4\sqrt{\pi}\xi_{ei} \int_0^{\infty} \frac{y \exp(-y^2) dy}{1 - \exp(-\pi\xi_{ei}/y)} \right]. \end{aligned}$$

Заметные различия между (1.11) и (1.18) для водородной плазмы наблюдаются в диапазоне температур $k_B T = (0.1 - 0.3)$ Ry.

В [308–311] рассматривается немного иной вариант “улучшенного” потенциала Кельбга (1.11), в котором функций $F(x)$ имеет дополнительный параметр γ , зависящий от температуры:

$$F(x, \gamma) = 1 - \exp(-x^2) + \sqrt{\pi}x(1 - \operatorname{erf}(\gamma x))/\gamma. \quad (1.19)$$

Изменение параметра γ сохраняет производную потенциала в нуле, но влияет на абсолютное значение $V_{cd}(r=0)$, что позволяет подогнать форму потенциала под результат численного расчета, использующего формализм матрицы плотности. Так для температуры $k_B T = 0.2$ Ry были найдены оптимальные значения $\gamma_{ei} = 0.78$, $\gamma_{ee} = 0.98$ (с учетом усреднения по спинам). При больших температурах γ стремится к единице. Как отмечается в [309], предложенные улучшения позволяют применять модифицированный потенциал Кельбга в области достаточно низких температур, в том числе за формальной границей вырождения плазмы ($\theta < 1$).

Отметим также еще одну форму псевдопотенциала с использованием функции ошибок, которая из-за своей простоты используется в ряде работ по молекулярно–

динамическому моделированию

$$V_{cd}^{\text{erf}}(r) = \frac{q_c q_d}{r} \text{erf} \left(\frac{r}{\lambda_{\alpha\beta}} \right). \quad (1.20)$$

Данный потенциал использовался, например, для моделирования равновесной неидеальной плазмы в [312], а также кластерной наноплазмы в [313]. Как будет показано ниже, он описывает взаимодействие двух гауссовских волновых пакетов.

Отдельный интерес представляют атомы щелочных металлов, в которых единственный электрон на внешней (валентной) оболочке имеет достаточно низкую энергию ионизации (4 – 5 эВ), а электроны внутренних оболочек — гораздо большую энергию (20 – 70 эВ). В связи с этим плазма щелочных металлов в широком диапазоне параметров может рассматриваться как однозарядная, а возбуждение электронов внутренних оболочек можно не учитывать. Взаимодействие внешнего электрона с ядром в этом случае хорошо описывается псевдопотенциалом Гельмана [314]:

$$V_{\text{ei}}^{\text{Hel}}(r) = -\frac{e^2}{r} (1 - A e^{-\alpha r}). \quad (1.21)$$

Выражение (1.21) внешне похоже на (1.14), однако для значений параметра $A > 1$ потенциал Гельмана экспоненциально возрастает при $r \rightarrow 0$, описывая тем самым отталкивание между валентным электроном и электронами внутренних оболочек. Потенциал Гельмана может также применяться для описания взаимодействия электронов и дырок в полупроводниках [33].

Приведенные в данном разделе модели псевдопотенциалов являются “микроскопическими” в том смысле, что они описывают взаимодействие отдельных электронов и ионов без учета микрополей в плазме, связанных с экранированием зарядов и другими многочастичными корреляциями. Эти потенциалы могут использоваться как в теоретических подходах, например, для расчета парных корреляционных функций с помощью гиперцепного приближения, так и в компьютерном моделировании, о котором пойдет речь в разделе 1.3. Эффективные потенциалы, действующие на частицы плазмы с учетом микрополей, обсуждаются, например, в [315].

1.2.3. Химическая модель плазмы и уравнения состояния вещества

Модель плазмы, рассмотренная в предыдущих разделах, основана на представлении плазмы в качестве квазиклассической или квантовой системы “фундаментальных частиц” — атомных ядер и электронов, которые, взаимодействуя друг с другом, могут образовывать атомы или молекулы в основном или возбужденном состояниях. Эту модель принято называть “физической” [316]. Как видно из рассмотренных примеров, расчет свойств неидеальной плазмы на основе физической модели является довольно трудоемкой задачей, особенно в области сильной неидеальности и в присутствии многозарядных ионов.

Наряду с этим возможно также упрощенное представление плазмы в виде набора свободных электронов, ионов, нейтральных атомов и, возможно, молекул, число которых изменяется в результате процессов ионизации и диссоциации аналогично химическим превращениям веществ. Этот подход получил название “химической модели”, которая также широко использовалась для расчета свойств неидеальной плазмы [32, 269, 275, 317–321].

За счет более простой формулировки химическая модель позволяет определить уравнение состояния вещества в более широкой области параметров плазмы, представляя собой приемлемый компромисс между точностью и сложностью вычислений. Она оказывается особенно полезной при рассмотрении систем, состоящих из различных элементов и/или ионов с различной кратностью ионизации. Основной задачей при использовании химической модели является построение модели свободной энергии плазмы (или иного термодинамического потенциала) с последующим нахождением его экстремального значения, определяющего свойства системы в состоянии равновесия.

Наиболее известным примером химической модели является уравнение Саха, связывающее между собой концентрации электронов, атомов и ионов с различной степенью ионизации [268]. В качестве входных параметров оно требует знания потенциала ионизации и статистических сумм указанных компонент плазмы. Его обобщение случай слабой неидеальности имеет вид

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \frac{1}{\lambda_e^3} \frac{g_e g_i}{g_a} e^{-\beta(I - \Delta I)}, \quad (1.22)$$

где n_a — концентрация атомов, g_e , g_i и g_a — статистические суммы электрона, иона и атома, I — потенциал ионизации атома, ΔI — величина снижения потенциала ионизации, которая в приближении Дебая-Хюккеля имеет вид $\Delta I = \Gamma_D k_B T$. Дальнейшее обобщение модели Саха с учетом эффектов неидеальности и экранирования зарядов в плазме рассмотрено в [33], где также приведены результаты расчетов в рамках химической модели для плазмы из различных элементов.

Многие работы в рамках химической модели посвящены исследованию атомарного водорода или частично ионизованной водородной плазмы в применении к задачам астрофизики [32, 317–319]. В [32] рассмотрена химическая модель для смеси атомов и молекул водорода, в которой свободная энергия представлена в виде суммы идеально-газовой составляющей, конфигурационной энергии межчастичного взаимодействия, энергии внутренних степеней свободы для атомов и молекул, а также квантово-механических поправок. При этом конфигурационная энергия определяется на основе парных псевдопотенциалов для различного типа частиц и корреляционной функции, полученной в приближении жестких сфер. Равновесное распределение компонент определяется путем минимизации свободной энергии при заданных объеме и температуре. Данный метод позволил рассчитать уравнение состояния с учетом диссоциации в широкой области параметров, а также получить ударную адиабату Гюгонио.

Дальнейшим развитием данного подхода было добавление в систему ионов H^+ и электронов, что позволило совместно рассматривать процессы термической диссоциации и ионизации [318], а также приближенно описать ионизацию давлением. Это потребовало существенной доработки модели взаимодействия частиц. Влиянием ионов H^- , H_2^+ и H_3^+ , как показано в [317], можно пренебречь ввиду их относительно низкой концентрации.

Неожиданным результатом расчетов [318] стало обнаружение фазового перехода первого рода между состояниями слабой и сильной ионизации с критической точкой при температуре $T = 15300$ К, давлении $P = 0.614$ Мбар и плотности $\rho = 0.347$ г/см³. Данный результат совместно с другими работами, предсказывавшими возможность плазменного фазового перехода (см., например [138, 299, 306, 322]), послужил стимулом для многих последующих экспериментальных и теоретических исследований. Экспериментальные результаты в

области существования этого перехода для водорода и дейтерия уже обсуждались в разделе 1.1.6. Среди недавних теоретических работ, посвященных этому вопросу, следует отметить [146, 170, 323]. При этом в различных источниках речь идет о плазменном (ионизационном), диссоциативном, диссоциативно-плазменном и энтропийном фазовых переходах, относящихся, по-видимому, к одному и тому же явлению.

В [319] на основе химической модели рассмотрена водородная плазма в диапазоне температур $10^4 - 10^6$ К и плотностей $0.1 - 1$ г/см³. Особое внимание уделено влиянию метода подсчета статистической суммы атома на описание эффекта ионизации давлением при больших плотностях плазмы, предложена оригинальная модель для эффективных чисел заполнения. В [269] выполнены расчеты для задач гелиосейсмологии, а кроме того, получено уравнение, связывающее поправку к давлению в химических моделях и выражение для статистической суммы атома в пределе высоких температур. Выполнение этого соотношения обеспечивает совпадение асимптотик для химической и физической моделей при высоких температурах. Обзор различных подходов для расчета электрон-ионного, атом-ионной и атом-атомного взаимодействий при построении химических моделей приведен в [275]. В [320, 321] введено понятие базовых химических моделей. Результатом этих работ являются выражения для давления и снижения потенциала ионизации атомов плазмы в зависимости от параметра неидеальности.

В работах [144, 146, 324] предложена оригинальная модификации химической модели для разогретого плотного вещества, в котором парное приближение оказывается неприменимым из-за значимого перекрытия волновых функций электронов соседних атомов, частичного обобществления электронов и образования зоны проводимости. В этом случае авторы предлагают использование энергии когезии как функции от плотности по аналогии с жидкими щелочными металлами. Вещество рассматривается как смесь атомов и молекул. Модель свободной энергии содержит три компонента: приближение идеального газа, вклад исключенного объема на основе модели жестких сфер (приближение Карнахана-Старлинга) и энергию когезии, которая заменяет интеграл от парного потенциала и парной корреляционной функции в стандартном квантово-статистическом подходе [325]. В работах [144, 146, 324] предложенный метод использован для исследования силь-

но сжатого водорода и дейтерия, в частности, аномальной сжимаемости, упомянутого выше диссоциативного фазового перехода и металлизации при больших давлениях.

Отдельно следует отметить разработку семейства вычислительных кодов “SAHA” для расчета термодинамических свойств неидеальной плазмы на основе химической модели. Код “SAHA-D” был использован для исследования ударно-сжатого водорода, дейтерия и гелия [134, 152, 170, 171, 326, 327]. Он включает в себя учет кулоновского взаимодействия на основе псевдопотенциалов, отталкивания между атомами и молекулами на малых расстояниях на основе модели “мягких сфер” и частичного вырождения свободных электронов. В пределах низких и высоких температур эта модель показала хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными по ударным адиабатам и расчетами методом интегралов по траекториям (см. раздел 1.3.5). В то же время эта модель пока не вполне согласуется с экспериментальными данными в области предполагаемого плазменного фазового перехода [170].

В работах [48, 49, 327, 328] была предложена модификация “SAHA-S”, основанная на модели [278] и имеющая точную дебаевскую асимптотику в пределе слабонеидеальной плазмы. По сравнению с “SAHA-D” эта модификация ориентирована на моделирование вещества с более низкой плотностью. С ее помощью было построено уравнение состояния для оболочки Солнца, состоящей из водорода и гелия с примесями азота, кислорода, углерода и неона, дающее хорошее согласие с данными гелиосейсмологии.

Очевидный недостаток всех описанных выше методов заложен в самой формулировке химической модели. Разделение электронов на свободные и связанные в атомах является довольно условным и не описывает, например, образование атомных кластеров, фрагментов кристаллической решетки или делокализацию электронов в результате ионизации давлением. Это требует добавление в расчет новых типов квазичастиц и существенного его усложнения.

Тем не менее, химическая модель позволила описать многие экспериментально наблюдаемые явления. Однако, для встраивания в расчетные коды более высокого уровня, например, гидродинамические модели, а также для решения многих других задач требуются относительно простые аналитические выражения, позво-

ляющие описать уравнение состояние вещества в широком диапазоне параметров, включая неидеальную плазму и разогретое плотное вещество. Для решения этих задач были разработаны полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояний вещества, в которых форма зависимостей термодинамических потенциалов от соответствующих переменных строится на основе теоретических моделей, а числовые коэффициенты определяются из наилучшего согласия с экспериментальными данными [329, 330]. В качестве источника данных для этих уравнений в области высоких давлений и температур часто выступают ударно-волновые эксперименты [331]. В качестве примеров уравнений, основанных на большом количестве экспериментальных данных, можно привести результаты для алюминия [332] и олова [196].

Широкодиапазонные уравнения состояния позволили исследовать воздействие на твердотельные мишени потоков заряженных частиц [254, 256] и лазерного излучения [191, 194], электровзрыв проводников [333–335], а также другие явления, связанные с образованием экстремальных состояний вещества [30].

1.2.4. Статистические методы, основанные на формализме электронной плотности

Уравнение Томаса-Ферми, позволяющее в рамках квазиклассического приближения определить функцию распределения электронов в атоме, изначально было предложено для расчета свойств атомов и ионов с большим зарядовым числом Z [336]. Можно показать, что оно становится точным в пределе $Z \rightarrow \infty$ [28]. Этот метод оказался полезным и для исследования свойств веществ в экстремальных состояниях, характеризующихся высокими давлениями и температурами [337–344].

Основными недостатками исходного уравнения Томаса-Ферми [337] являются отсутствие учета обменного взаимодействия, существенного при больших плотностях, корреляционных эффектов, связанных с неидеальностью плазмы, а также квантово-механических эффектов, выходящих за рамки квазиклассического приближения. На устранение этих недостатков и были направлены многие из последующих работ.

Расчеты с учетом простейшей модели обменного взаимодействия при ненулевой температуре впервые проведены в [337]. Квантовые поправки для электронной плотности на малых расстояниях предложены в [345]. Корреляционные и другие поправки для метода Томаса-Ферми рассмотрены в обзорах [338, 340]. Алгоритм и программа моделирования многокомпонентной системы описаны в [343].

Согласно [338] применение метода Томаса-Ферми оправдано в области относительно высоких температур $T > E_h/k_B = 27$ эВ и плотностей $n_e > a_B^{-3} = 6.7 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$. В более поздних работах [341, 342, 344] проведено детальное исследование области применимости метода с учетом обменного взаимодействия, квантовых поправок и усовершенствованного алгоритма расчета термодинамических функций. Предложенный авторами этих работ алгоритм позволяет проводить расчеты для температуры $T > E_h/k_B = 2$ эВ и концентрации электронов $n_e = (10^{20} - 10^{27}) \text{ см}^{-3}$ при $Z = 1$.

Развитием подхода Томаса-Ферми стало появление теории функционала электронной плотности и основанных на нем вычислительных методов, описанных в разделе 1.3.4.

1.3. Компьютерное моделирование неидеальной плазмы на основе атомистических подходов

Теоретическое описание неидеальной плазмы (см. раздел 1.2), как правило, строится на уточнении теории идеальных систем (классической электрон-ионной плазмы или вырожденного газа электронов в металлах), в которой то или иное приближение позволяет учесть эффекты близких столкновений частиц. Альтернативой этому является прямое численное моделирование, в котором близкие столкновения частиц изначально учитываются в явном виде, а приближения касаются вида межчастичного взаимодействия, размеров моделируемой системы, времени исследуемых процессов, интерпретации полученных из численного моделирования данных с учетом их статистической достоверности.

В то время как для систем заряженных частиц с незначительной ролью столкновительных процессов хорошо работают численные методы, основанные на пред-

ставлении вещества в качестве сплошной среды (численное решение уравнений Власова-Пуассона или Власова-Максвелла, метод Particle-in-Cell и др.), необходимость учета близких столкновений выводит на первый план методы атомистического моделирования, в которых вещество рассматривается на уровне отдельных частиц (атомов, молекул, электронов, ионов). Наиболее явными представителями этого класса являются методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

Подробное описание современных реализаций этих методов можно найти в сборнике [346] и монографиях [347, 348]. В данном разделе мы рассмотрим применение атомистических подходов для исследования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества.

1.3.1. Моделирование неидеальной плазмы методом Монте-Карло

Развитие методов атомистического моделирования неразрывно связано с историей вычислительной техники. Расчет уравнения состояния системы “твердых сфер” методом Монте-Карло (МК) был проведен на одной из первых электронных вычислительных машин MANIAC I (Mathematical Analyzer Numerical Integrator and Automatic Computer Model) в 1953 году [349]. Именно в этой работе Н. Метрополисом был предложен алгоритм, позволяющий рассчитывать равновесные свойства модельной системы из N частиц с заданным потенциалом взаимодействия, ставший впоследствии стандартом для задач подобного типа.

Алгоритм Метрополиса позволяет определить среднее значение некоторой величины F , зависящей от координат частиц $\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$, в каноническом ансамбле путем вычисления интеграла

$$\langle F \rangle = \left(\int F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\beta U} d^{3N} \mathbf{r} d^{3N} \mathbf{p} \right) / \left(\int e^{-\beta U} d^{3N} \mathbf{r} d^{3N} \mathbf{p} \right), \quad (1.23)$$

где $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — потенциальная энергия системы взаимодействующих частиц, которая в простейшем случае может быть выражена в виде суммы

$$U = \sum_i^N \sum_{j>i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (1.24)$$

$V(r)$ — парный потенциал взаимодействия.

Основой алгоритма является построение последовательности состояний системы (цепи Маркова), вероятность которых распределена по закону $\exp(-\beta U)$. В этом случае среднее значение искомой величины равно $\langle F \rangle = \lim_{N_{st} \rightarrow \infty} (1/N_{st}) \sum_k^{N_{st}} F_k$, где N_{st} — число состояний, а F_k — значение величины F в состоянии k . Состояние $k + 1$ получается из состояния k путем небольших случайных смещений частиц $\mathbf{r}_i^{k+1} = \mathbf{r}_i^k + \xi_i$. Новое состояние принимается всегда, если изменение энергии отрицательно $\Delta U = U^{k+1} - U^k < 0$, либо принимается с вероятностью $\exp\{-\Delta U/(k_B T)\}$, если $\Delta U > 0$. В дальнейшем этот метод был обобщен на случай большого канонического ансамбля [350].

Несмотря на большую трудоемкость программирования ламповых ЭВМ, авторам [349] удалось провести расчет для двухмерной системы с 224 “жесткими сферами”. В работе [351] был использован уже непрерывный потенциал Леннарда-Джонса.

В одной из первых работ по моделированию однокомпонентной неидеальной плазмы (см. раздел 1.2.1), состоящей из ионов на однородном отрицательном фоне, проведен расчет парных корреляционных функций для параметра неидеальности в диапазоне $\Gamma_{ii} = 0.05 - 100$ [352]. Расчет проводился методом МК для системы из 32 – 500 частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала. В работе также подробно рассматриваются два варианта граничных условий:

а) метод ближайшего образа, при котором каждая частица взаимодействует с $N - 1$ ближайшими соседями, находящимися на расстоянии, не превышающем $L/2$ по каждой оси с учетом периодичности, где $L = V^{1/3}$ - длина стороны кубической ячейки моделирования;

б) метод Эвальда, в котором производится суммирование по условной бесконечно периодически повторяющейся базовой ячейке $L \times L \times L$ с использованием двух быстро сходящихся сумм: в реальном пространстве для короткодействующей части взаимодействия и в Фурье-пространстве для дальнедействующей.

В работе отмечается, что для значений параметра неидеальности $\Gamma_{ii} < 10$ оба метода дают одинаковый результат в пределах погрешности.

В последующих работах по моделированию неидеальной плазмы методами

Монте-Карло и молекулярной динамики используются оба варианта граничных условий. Например, работах [353–356] используется метод ближайшего образа, а в [357–361] — схема Эвальда. Следует отметить, что для однокомпонентной плазмы с параметром неидеальности $\Gamma_{ii} \gtrsim 100$ применение схемы Эвальда действительно оправдано, так как при этих условиях можно ожидать появление дальнего порядка для ионов и их кристаллизации. В то же время использование схемы Эвальда для моделирования электрон–ионной плазмы в области $\Gamma \approx 1$ вызывает сомнения, так как в этом случае система, как правило, не имеет дальнего порядка, и применение схемы Эвальда может исказить результат. Для улучшения учета эффектов взаимодействия на дальних расстояниях в этом случае более обоснованным является увеличение числа частиц в системе. В разделе 1.3.2 обсуждается также использование отражающих граничных условий.

Сравнение результатов моделирования [352] с теоретическими моделями показало, что приближение Дебая-Хюккеля дает неплохой результат для функции распределения ионов при $\Gamma_{ii} < 1$, а в области $1 < \Gamma_{ii} < 2$ удовлетворительное согласие наблюдается с расчетом по методу Перкуса-Йевики. Результаты для гиперцепного приближения выглядят хуже, хотя в дальнейшем именно оно стало общепринятым методом теоретического расчета парных корреляционных функций и статического структурного фактора. Также в [352] приведены неопубликованные на тот момент результаты Хувера по МД моделированию системы из 64 ионов, являющиеся, по-видимому, первым результатом, полученными этим методом для неидеальной плазмы.

В 1969 году Норманом и Филиновым был предложен метод Монте-Карло для большого канонического ансамбля [350]. В этом методе каждое новое состояние системы получается из предыдущего либо путем изменения положения частиц, как в исходном методе МК, либо путем изменения числа частиц в системе при постоянном объеме. Примеры расчетов фазового перехода пар–жидкость в инертных газах и ионизационного перехода в слабонеидеальной плазме показали хорошее согласие с вириальным разложением и приближением Дебая-Хюккеля, соответственно. Авторы отмечают, что те же результаты могли бы быть получены и с помощью обычного метода МК в каноническом ансамбле, но это потребовало бы гораздо большего числа частиц в системе. Таким образом, основное преиму-

щество данного метода — возможность исследования фазового пространства и предсказания переходов за счет высокой скорости вычислений (в работе расчеты проведены для 30-40 частиц).

Большой вклад в развитие методов моделирования неидеальной плазмы внесла серия работ Хансена и МакДональда, которые использовали как метод Монте-Карло [357, 358], так и метод молекулярной динамики [359, 361–363].

Работы [357–359], в которых рассматривается однокомпонентная неидеальная плазма ионов, являются развитием метода [352]. В [357] приведено обобщение схемы Эвальда на случай потенциала вида $V \sim r^{-n}$ с произвольным значением n . На основе моделирования методом МК получены результаты для внутренней энергии, теплоемкости, бинарной корреляционной функции и структурного фактора, предложено полуэмпирическое уравнение состояния неидеальной плазмы для $\Gamma_{ii} = 1 - 160$. Расчеты проводились для $N = 16 - 250$.

В [358] расчеты продолжены для параметра неидеальности ионов в диапазоне $\Gamma_{ii} = 140 - 300$, с помощью которых подтверждено появление вигнеровского кристалла. Расчеты показали, что фазовый переход происходит при $\Gamma_{ii} = 155 \pm 10$. Последующие расчеты с более точной аппроксимацией потенциала взаимодействия по схеме Эвальда [364] привели к уточнению этого значения до $\Gamma_{ii} = 168 \pm 4$. В [365] обсуждается зависимость этого результата от числа частиц в системе.

На основании расчетов [357, 358] в [360] было построено модельное уравнение состояния однокомпонентной неидеальной плазмы в диапазоне параметра неидеальности $1 < \Gamma_{ii} < 140$, которое имеет вид $U/(Nk_B T) = a\Gamma + b\Gamma^{1/4} + c$. Уточнение этого результата с оценкой требуемого числа частиц выполнено в [366]. Там же опубликованы критические значения параметров неидеальности для формирования кристаллической решетки типа ОЦК ($\Gamma_{ii} = 178$) и ГЦК ($\Gamma_{ii} = 192$).

Как было отмечено выше, однокомпонентная модель плазмы ионов применяется при вырождении электронов, т.е. в области IV на рис. 1.1. Для остальных частей фазовой диаграммы динамика электронов имеет существенное значение, причем в интересующей нас области II невырожденной неидеальной плазмы электроны можно с хорошей точностью считать классическими частицами и рассматривать в МК моделировании наряду с ионами.

Первая работа по моделированию двухкомпонентной электрон-ионной плаз-

мы методом МК относится, по-видимому, к 1965 году [367]. В этой работе удалось получить траекторию из 6100 шагов для 16 электронов и 16 ионов при концентрации $n_e = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и температуре $T_e = 10^4 \text{ К}$. Результатом стало определение внутренней энергии и бинарной корреляционной функции, однако высокая статистическая погрешность (усреднение проводилось всего по 2100 шагов одной траектории) не позволила получить результат достаточной точности для сопоставления с имеющимися теоретическими моделями, кроме теории Дебая-Хюккеля. Более надежные данные удалось получить в [368], хотя и они в дальнейшем были подвергнуты критике из-за использованной модели электрон-ионного потенциала.

Следует отметить, что с вычислительной точки зрения моделирование двухкомпонентной системы представляет гораздо большую сложность из-за притяжения между электронами и ионами и, следовательно, возможности сближения электрона и иона, при котором абсолютное значение кулоновской энергии взаимодействия неограниченно возрастает. В этом случае ограничение электрон-ионного потенциала на близких расстояниях необходимо как с точки зрения учета квантово-механических эффектов, так и с вычислительной точки зрения.

В работе [368] для решения этой проблемы был использован потенциал (1.17) с отсечкой на уровне $r_b = 2a_B$, при которой потенциал электрон-ионного взаимодействия оказался достаточно глубоким. Немного иная форма псевдопотенциала предложена в [369], но также с большой глубиной потенциальной ямы. Обсуждение этих результатов приводится в [306], где отмечается образование при данном подходе большого количества комплексов типа H^- и H_2^+ , не наблюдаемых в таком количестве в экспериментах. В результате в [306] был предложен потенциал (1.17) с отсечкой на уровне энергии $2k_B T < \epsilon_b < 4k_B T$, с помощью которого удалось получить результаты, достаточно близкие к другим теоретическим оценкам и экспериментальным данным для плазмы цезия.

В последующих работах Валуева, Нормана и Филинова, начиная с [370], используется отсечка потенциала (1.17) на уровне $\epsilon_b = 3k_B T$. В [353, 370] в рамках такой модели получены результаты для парных корреляционных функций в диапазоне параметра неидеальности $0.7 < \Gamma < 2.7$ и различного заряда ионов. Обзор результатов, полученных с помощью метода МК для однокомпонентной и двухкомпонентной плазмы, приведен в книге [354], где на основе результатов

моделирования обсуждается возможность плазменного фазового перехода.

Исторически метод Монте-Карло оказался первым из атомистических подходов для моделирования неидеальной плазмы из первых принципов, т.е. основанным на фундаментальных законах взаимодействия частиц, а не на эмпирических закономерностях (в настоящее время “первопринципными” чаще называют расчеты методом функционала плотности или квантовой химии). С его помощью получено большое количество результатов, наиболее существенным из которых, пожалуй, является исследование кристаллизации однокомпонентной плазмы при больших плотностях. Основным недостатком метода является отсутствие возможности моделирования динамических процессов и неравновесных сред. Решение этой проблемы привело к созданию метода молекулярной динамики, описанного в следующем разделе.

1.3.2. Метод классической молекулярной динамики

Всего через несколько лет после создания метода Монте-Карло появились и первые расчеты методом молекулярной динамики (МД), основанном на численном решении классических уравнений движения для системы из N взаимодействующих материальных точек с заданными начальными условиями:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\frac{1}{m_i} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \mathbf{r}_i(0) = \mathbf{r}_i^0, \quad \dot{\mathbf{r}}_i(0) = \mathbf{v}_i^0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (1.25)$$

В [371] таким образом была промоделирована система из 32 – 108 жестких сфер, хотя алгоритм расчета заключался в нахождении времени ближайшего столкновения, а не в расчете непрерывной траектории.

Появление в 1960-х годах транзисторных ЭВМ позволило почти на 3 порядка увеличить скорость вычислений и проводить расчеты для систем с более сложными моделями взаимодействия, большим числом частиц и меньшей статистической погрешностью результатов. Это позволило выполнять интегрирование уравнений (1.25) с помощью разностных схем и находить непрерывные траектории движения частиц.

Исследование динамических характеристик однокомпонентной неидеальной

плазмы с помощью МД моделирования проведено в [359]. Для интегрирования уравнений движения в этой работе использовалась разностная схема Верле [372], ставшая фактически стандартной для МД моделирования. Несмотря на невысокий (второй) порядок аппроксимации, она обладает высокой устойчивостью для задач осцилляторного типа, к которым относится моделирование движения частиц в замкнутой области. Ей также свойственно отсутствие численного дрейфа полной энергии изолированной системы, при этом она достаточно проста в реализации.

Величина шага по времени Δt выбирается, как правило, таким образом, чтобы точность сохранения рассчитываемой полной энергии изолированной системы была не хуже 1 %. Сохранение импульса в схеме Верле обеспечивается на уровне ошибок округления за счет использования третьего закона Ньютона.

В [359] представлены первые результаты для автокорреляционной функции скоростей ионов $K_v(t) = \langle \mathbf{v}(t)\mathbf{v}(0) \rangle / \langle \mathbf{v}^2(0) \rangle$, динамического структурного фактора $S(\omega, k)$ (см. ниже) и спектра колебаний ионной решетки при $\Gamma_{ii} = 1 - 152$. Также приведены оценки коэффициента диффузии и сдвиговой вязкости. Уточнение этих результатов с использованием потенциала Кельбга (1.11) выполнено значительно позже в [373].

Многие последующие работы по МД моделированию однокомпонентной неидеальной плазмы связаны с исследованием вязкости и теплопроводности (см., например, [374–376]). Этим методом рассматривались и неравновесные системы, например, в [377] исследуется процесс установления бинарных корреляций и релаксации функции распределения.

Для двухкомпонентной плазмы полная энергия системы описывается гамильтонианом

$$H = K_i + K_e + U_{ii} + U_{ei} + U_{ee} + U_{\text{ext}}, \quad (1.26)$$

где K_i и K_e — кинетическая энергия электронов и ионов

$$K_i = \frac{m_i}{2} \sum_i^{N_i} \mathbf{v}_i^2, \quad K_e = \frac{m_e}{2} \sum_k^{N_e} \mathbf{v}_k^2, \quad (1.27)$$

а $U = U_{ii} + U_{ei} + U_{ee}$ — потенциальная энергия взаимодействия

$$\begin{aligned}
 U_{ii} &= \sum_i^{N_i} \sum_{j<i}^{N_i} V_{ii}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|), & U_{ei} &= \sum_i^{N_i} \sum_k^{N_e} V_{ei}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_k|), \\
 U_{ee} &= \sum_k^{N_e} \sum_{m<k}^{N_e} V_{ee}(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_m|), & & (1.28)
 \end{aligned}$$

\mathbf{r} и \mathbf{R} — координаты электронов и ионов, а U_{ext} — внешний потенциал, который может включать поле, действующее на частицы, или задавать специальные граничные условия.

При МД моделировании такой системы проблема выбора потенциала электрон–ионного взаимодействия V_{ei} стоит еще более остро, чем в методе МК, так как сближение разноименных зарядов приводит к резкому увеличению их кинетической энергии и росту численных ошибок при интегрировании уравнений движения. При большой “глубине” притягивающего потенциала необходимо либо уменьшать шаг по времени (что приводит к увеличению времени расчета), либо использовать схему с переменным шагом.

Другой проблемой здесь является большое отношение тепловых скоростей ионов и электронов в равновесной плазме, которое даже для водорода составляет $(m_i/m_e)^{1/2} \approx 43$. Поскольку шаг интегрирования уравнений движения необходимо выбирать, исходя из средних скоростей электронов, объем статистического усреднения по положению ионов часто оказывается недостаточным. Решением этой проблемы в первых работах по МД моделированию электрон–ионной плазмы было моделирование динамики электронов при неподвижных ионах с последующим усреднением результатов для различных конфигураций ионов, полученных методом МК [355, 356]. Альтернативным решением этой проблемы является использование меньшего отношения масс с последующим масштабированием результатов для динамики ионов [95].

Моделирование совместной динамики электронов и ионов проведено в работах [361, 362]. В [361] исследована неидеальная плазма с параметрами $\Gamma = 2$, $n_e = 1.6 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$, $T = 1.58 \cdot 10^5 \text{ К}$, а для описания электрон–электронного и электрон–ионного взаимодействий использован потенциал Дойча (1.14). Авторы

отмечают произвольность выбора псевдопотенциала, однако в исследуемой ими области параметров не ожидают заметного влияния короткодействующей части псевдопотенциала на результаты расчетов. В [362] указанные выше расчеты были продолжены для более широкого диапазона параметров плазмы $\Gamma = 0.5 - 2.0$, $n_e = (1.6 - 25) \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$, $T = (1.58 - 15.8) \cdot 10^5 \text{ К}$, а в качестве потенциала взаимодействий был использован модифицированный потенциал Дойча с приближенным учетом антисимметризации для электронов (1.15).

В работах [312, 378, 379] также использовался потенциал Дойча, но без учета антисимметризации, а в [200, 380–382] — с учетом антисимметризации, в серии работ Нормана и Валуева [355, 356, 383–391] был использован псевдопотенциал с отсечкой (1.17), а в работах [307, 392] — потенциал Кельбга. Сравнение различных типов псевдопотенциалов для МД приведено в [312, 382]. Рассмотрим более подробно результаты, полученные в указанных работах.

Наиболее простым результатом, позволяющим протестировать корректность работы программы и правильность выбора параметров численной схемы, является расчет парных корреляционных функций. Результаты расчета этих функции для различных пар частиц ($e-i$, $e-e$ и $i-i$) в области высоких температур ($T > 10^4 \text{ К}$) в [361, 362] хорошо совпали гиперцепным приближением и впоследствии практически не пересматривались. Аналогичные расчеты в области более низких температур (до 10^4 К) проведены позже в [307], где зависимость от использованного псевдопотенциала является более явной и совпадение с теоретическими расчетами не столь очевидно.

Принципиально новым результатом работ [361, 362], показавшим преимущества метода МД по сравнению с МК, является расчет автокорреляционной функции скоростей и коэффициента диффузии. Следует отметить, что в некоторых последующих работах (см., например, [383]) сообщалось об осцилляторном характере затухания автокорреляторов скоростей и токов в равновесной двухкомпонентной плазме, но, по-видимому, эти колебания были связаны с недостатком статистики и впоследствии не подтвердились [95, 362, 388].

Первые оценки проводимости неидеальной плазмы методом МД были получены из коэффициента диффузии электронов [355]. В последующих работах проводимость определялась на основе теории линейного отклика путем инте-

грирования автокоррелятора тока [95, 356, 362]. Эти расчеты выявили заметные отличия от формулы Ландау-Спитцера [89, 108]. В [286, 393] выполнено сопоставление результатов МД моделирования для проводимости с рядом современных теоретических моделей. Более подробное обсуждение расчета проводимости методом МД, в том числе динамической проводимости, т.е. зависящей от частоты возмущающего поля, приведено в главе 2.

Нестандартный подход к определению проводимости и эффективной частоты электрон-ионных столкновений применен в [394], где МД система подвергается воздействию внешнего поля, при этом измеряется величина поглощенной в плазме энергии. Для поддержания параметров плазмы используется термостат. Недостаток этого метода состоит в том, что малая амплитуда внешнего поля не дает возможности наблюдать нагрев плазмы на фоне термодинамических флуктуаций, а большая амплитуда приводит к нелинейным эффектам. Решение, предложенное авторами, заключалось в экстраполяции полученной зависимости от амплитуды внешнего поля к пределу линейных возмущений.

Динамический структурный фактор “заряд-заряд” для двухкомпонентной плазмы $S_{zz}(\omega, k) = \frac{1}{2}[S_{ii}(\omega, k) + S_{ee}(\omega, k) - 2S_{ei}(\omega, k)]$ исследовался в [95, 312, 361, 362, 379, 382, 385, 388]. Эта величина имеет важное значение, так как она связана с комплексной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega, k)$ соотношением

$$S_{zz}(\omega, k) = -\frac{k_B T}{4\pi n e^2} \frac{k^2}{\omega} \operatorname{Im} \frac{1}{\varepsilon(\omega, k)}. \quad (1.29)$$

В случае МД моделирования динамические структурные факторы $S_{cd}(k, t)$ для пар частиц c, d обычно рассчитываются из Фурье-преобразования автокоррелятора плотности $F_{cd}(k, t)$, который в свою очередь выражается через спектраль-

ные функции плотности $\rho(\mathbf{k}, t)$:

$$S_{cd}(\omega, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} F_{cd}(k, t) dt, \quad (1.30)$$

$$F_{cd}(k, t) = \frac{1}{N_c N_d} \langle \rho_c(\mathbf{k}, t) \rho_d(-\mathbf{k}, 0) \rangle, \quad (1.31)$$

$$\rho_c(\mathbf{k}, t) = \sum_{k=1}^{N_c} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_k(t)), \quad (1.32)$$

где $\mathbf{r}_k(t)$ — мгновенная координата частицы с номером k . Усреднение в (1.31) производится по начальным моментам времени и по направлениям вектора \mathbf{k} .

В результате таких расчетов в [361, 362] показано, что динамические структурные факторы в двухкомпонентной плазме существенно отличаются от аналогичных результатов для однокомпонентной плазмы. Эти расчеты также позволили подтвердить гипотезу о существовании плазменных волн в неидеальной плазме [290]. Полученная дисперсия ленгмюровских плазменных волн, частота которых определяется соответствующим максимумом $S_{zz}(\omega, k)$, демонстрирует существенные отличия от случая бесстолкновительной плазмы, однако в [361, 362] результат был получен только для трех точек на фазовой диаграмме, и его точность оставляла желать лучшего.

Последующие работы позволили исследовать дисперсию и затухание плазменных волн в более широкой области параметров. В частности, в [95] показано, ленгмюровские плазменные волны существуют в электрон–ионной плазме по крайней мере при $\Gamma < 4$, а их дисперсия может быть описана выражением для диэлектрической проницаемости [395]

$$\varepsilon(\omega, k) = 1 + \frac{1}{k^2} \frac{1 - J_+\left(\frac{\omega+i\nu}{k}\right)}{1 - \frac{i\nu}{\omega+i\nu} J_+\left(\frac{\omega+i\nu}{k}\right)}, \quad J_+(x) = x e^{-x/2} \int_{i\infty}^x e^{t^2/2} dt, \quad (1.33)$$

полученным в приближении слабых столкновений, при условии, что эффективная частота столкновений ν заменяется на значение из МД расчетов. Полученная в [95] зависимость $\nu(\Gamma)$ существенно отличается от выражения для плазмы со

слабыми столкновениями [89], которое оказывается неприменимым работать при $\Gamma > 0.1$. При росте неидеальности значение ν проходит через максимум при $\Gamma \approx 2$, оставаясь при этом в четыре раза меньше плазменной частоты. Это говорит о том, что ленгмюровские плазменные волны в электрон–ионной плазме существуют по крайней мере до границы вырождения (согласно предсказаниям теории идеальной плазмы они не существуют вследствие сильного затухания). Зависимость $\nu(\Gamma)$ хорошо согласуется со значением так называемой динамической частоты столкновений, которая обсуждается в главе 2. Более подробно вопрос существования плазменных волн в неидеальной плазме обсуждается в [396].

В [359, 362] наряду с данными моделирования обсуждается теоретический метод построения $S_{cd}(\omega, k)$, основанный на соотношениях для частотных моментов этой функции $\Omega_{cd}^{(\nu)}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu S_{cd}(\omega, k) d\omega$ (метод моментов). Отличными от нуля здесь оказываются моменты четных порядков:

$$\begin{aligned} \Omega_{cd}^{(0)}(k) &= S_{cd}(k), & \Omega_{cd}^{(2)}(k) &= \delta_{cd} \frac{k_B T k^2}{m_c}, \\ \Omega_{cd}^{(4)}(k) &= \frac{k_B T k^2}{(m_c m_d)^{1/2}} \left(\delta_{cd} \frac{3k_B T k^2}{m_c} + \delta_{cd} \sum_f \frac{K_{cf}}{m_c} - \frac{L_{cd}(k)}{(m_c m_d)^{1/2}} \right), \end{aligned} \quad (1.34)$$

где

$$K_{cd} = \frac{n_i}{3} \int \nabla^2 V_{cd}(r) g_{cd}(r) d^3 \mathbf{r}, \quad L_{cd} = n_i \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} g_{cd}(r) \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \nabla}{k} \right)^2 V_{cd}(r) d^3 \mathbf{r},$$

$g_{cd}(r)$ — бинарная функция распределения, $S_{cd}(k) = \frac{1}{N_c N_d} \langle \rho_c(\mathbf{k}) \rho_d(-\mathbf{k}) \rangle$ — статистический структурный фактор, связанный с $g_{cd}(r)$ соотношением:

$$S_{cd}(k) = \delta_{cd} + 4\pi n_i \int_0^\infty \frac{\sin kr}{kr} (g_{cd}(r) - 1) r^2 dr.$$

Восстановление $S_{cd}(\omega, k)$ производится на основе формулы Неванлинны, при этом расчет $S_{cd}(\omega, k)$ может быть сделан либо на основе данных МД моделирования, либо аналитически из псевдопотенциала в рамках гиперцепного приближения. Развитие этого похода для однокомпонентной плазмы получило продолжение в серии работ Ткаченко и соавторов [397–401].

В [386–388] были рассмотрены стохастические свойства неидеальной плазмы. За счет сильного межчастичного взаимодействия в ней происходит достаточно быстрое перемешивание траекторий и потеря динамической памяти. В реальной системе причиной начального отклонения траекторий движения частиц от точного решения уравнений (1.25) является взаимодействие с окружением, а в компьютерном эксперименте — воздействие специального источника шума, термостата или даже численных ошибок интегрирования уравнения движения. В любом случае из-за схоластичности системы начальные отклонения траекторий возрастают экспоненциально и за достаточно короткое время приводят к потере динамической памяти и необратимости динамики частиц во времени. Это время необходимо учитывать при анализе некоторых результатов МД моделирования. В указанных работах был определен максимальный показатель Ляпунова, определяющей скорость разбегания траекторий, а также время динамической памяти в зависимости от параметров плазмы.

В отличие от метода Монте-Карло молекулярно-динамическое моделирование позволяет исследовать системы вне термодинамического равновесия. Так в работах [200, 363, 380–382, 389, 390, 402] была рассмотрена неизотермическая неидеальная плазма, в которой для подсистем электронов и ионов существует локальное равновесие, однако их температуры не совпадают. При образовании неидеальной плазмы в процессе воздействия на вещество лазерного излучения или потока частиц, в ударных волнах, ее начальное состояние, как правило, оказывается неизотермическим.

Первый расчет времени электрон–ионной релаксации в неизотермической плазме проведен в [363]. В дальнейшем эти данные были существенно уточнены. Как и в случае с проводимостью плазмы, значение времени релаксации при $\Gamma > 0.1$ заметно отличается от выражения Ландау–Спитцера, но в то же время согласуется с результатами МД расчетов для эффективной частоты столкновений. В [200, 381, 382, 402] приведено сравнение результатов МД моделирования с теоретическими моделями, а в [200] — с результатом эксперимента [199]. Теоретическому исследованию релаксации в двухтемпературной неидеальной плазме посвящены, например, работы [403–407].

В [389] описан так называемый небольцмановский этап электрон–ионной ре-

лаксации, предшествующий основному (больцмановскому) этапу, на котором разность температур электронов и ионов убывает экспоненциально $|T_e - T_i| \sim e^{-t/\tau}$. Небольцмановский этап характеризуется временем $\tau_{нВ}$, отношение которого к периоду плазменных колебаний $2\pi/\omega_p$ растет с ростом параметра неидеальности. На временах $t < \tau_{нВ}$ может наблюдаться немонотонная зависимость разности средних кинетических энергий электронов и ионов от времени. Время $\tau_{нВ}$ коррелирует с временем динамической памяти, что объясняет неприменимость кинетической теории газов на данном этапе.

Другим примером неравновесной среды является наноплазма, образованная под воздействием фемтосекундного лазерного импульса на металлический или атомарный кластер (см. раздел 1.1.7). За счет того, что число атомов в кластере во многих случаях не превышает 10^5 , такая система в методе МД может быть описана целиком. В этом случае граничные условия устанавливаются далеко за пределами системы и не влияют на ход моделирования. Поскольку временные масштабы движения электронов и ионов сильно различаются, в некоторых работах динамика электронов рассматривается при неподвижных ионах (см., например, [408–410]).

С помощью МД моделирования для кластерной наноплазмы были исследованы процессы внутренней и внешней ионизации электронов [313, 408, 410–414], разлета кластера за счет кулоновского отталкивания (кулоновского взрыва) [239, 415–417], резонансного поглощения лазерного излучения [409, 411, 418, 419], обмена энергией между электронами и ионами за счет столкновений [420], эмиссии электронов и ионов из кластерной наноплазмы [421, 422] и др. При этом в [414, 423] добавлен учет релятивистских эффектов для электронов. В некоторых из указанных работ для повышения производительности использовался алгоритм “TreeMD”, о котором пойдет речь в разделе 1.3.3. Обзор методов атомистического моделирования кластерной наноплазмы приведен в [228].

Отдельно следует отметить работу [412], в которой на основе МД моделирования рассматривается механизм поглощения энергии излучения в ультрафиолетовом диапазоне ионизованным кластером ксенона. В работе показано, что сформированная в результате воздействия светового импульса с интенсивностью $1.5 \cdot 10^{12} - 7 \cdot 10^{13}$ Вт/см², длительностью 100 фс и длиной волны 98 нм наноплазма является неидеальной с параметром неидеальности $\Gamma = 0.1 - 1.5$. Неидеальность

кластерной наноплазмы обсуждаются также в [413], где приведена оценка эффективной частоты электрон–ионных столкновений для ионизованных кластеров Xe_500 и Xe_5000 , и в теоретической работе [424].

При любом из описанных выше типов псевдопотенциала в процессе МД моделирования возникают связанные состояния электронов и ионов с различным временем жизни. В отличие от химических моделей плазмы эти состояния не выделяются в отдельный тип частиц, однако алгоритм, описанный в [425], позволяет определить наличие такой связи, исходя из энергии взаимодействия и характера движения электрона относительно иона. На основе этого алгоритма в [425–427] определен энергетический спектр связанных состояний, распределение их времен жизни в зависимости от степени неидеальности, заряда ионов и глубины отсечки потенциала электрон–ионного взаимодействия. Выделена также область локализованных состояний электронов относительно нескольких ионов. На основе полученных данных приведена оценка скорости столкновительной рекомбинации.

Отдельно следует выделить работы по МД моделированию ультрахолодной плазмы (см. раздел 1.1.8). Из-за низкой плотности плазмы, отсутствия вырождения электронов и квазиклассического характера их взаимодействия с ионами в области ридберговских состояний, метод классической МД оказывается здесь наиболее удачным выбором (хотя применяются и другие подходы, см. [428]). Здесь также следует разделить работы по моделированию однокомпонентной плазмы ионов на нейтрализующем фоне отрицательного заряда [429–431] и двухкомпонентной плазмы [432–440]. При этом проблема выбора псевдопотенциала электрон–ионного и электрон–электронного взаимодействия становится менее острой, так как учет квантово-механических поправок требуется уже на гораздо меньших расстояниях. В этом случае выбор отсечки потенциала $V_{ei}(r)$ определяется скорее из соображений вычислительной устойчивости алгоритма, а для обеспечения сохранения полной энергии на уровне 0.1 – 1 % для потенциалов, близких к кулоновскому, используется алгоритм с переменным шагом по времени, заимствованный из практики моделирования гравитационной задачи N -тел [441].

В [433, 434] рассматривается начальная стадия релаксации электронов ультрахолодной плазмы, возникающая на временах порядка нескольких периодов плазменных колебаний τ_e , на которой резкий рост кинетической энергии проис-

ходит за счет установления пространственных корреляций. Это снижает степень неидеальности плазмы и ограничивает дальнейшее установление корреляций. Данный эффект соответствует небыстрым стадиям релаксации, рассмотренной в [389] для традиционной (горячей) плазмы. Дальнейшая фаза более медленного роста кинетической энергии электронов обеспечивается за счет трехчастичной рекомбинации. Процесс рекомбинации на ридберговские уровни также достаточно подробно рассматривается в [434]. Частота рекомбинации оказалась близкой к известной зависимости для идеальной плазмы, однако авторы отмечают важность учета быстрого изменения температуры электронов на начальном этапе.

Дополнительно в [434] отмечается возникновение упорядоченной структуры ионов при дальнейшем лазерном охлаждении плазмы после ионизации. Более подробно этот вопрос, включая процесс расширения плазмы и возникновение вигнеровского кристалла для ионов, рассмотрен в [429].

Релаксация ионной подсистемы рассматривалась в [442] в рамках модели однокомпонентной плазмы, где моделирование ионов описывалось потенциалом Юкавы $V_{ii}(r) = e^2 \exp(-kr)/r$. Основное внимание уделялось объяснению обнаруженных в [263] осцилляций температуры ионов и установлению ионных корреляций. В [430, 431] с помощью той же модели исследована самодиффузия ионов. Для увеличения числа частиц в системе здесь использовался метод частиц в ячейке (см. раздел 1.3.3).

Цикл работ [435–440] по МД моделированию двухкомпонентной ультрахолодной плазмы посвящен исследованию скорости трехчастичной рекомбинации [435], диффузии ионов и электронов [436, 438], проводимости [437, 438], теплопроводности и сдвиговой вязкости [439], распределения микрополя вокруг ионов [440]. Результаты для диффузии ионов с хорошей точностью согласуются с экспериментальными данными [266] и результатами моделирования однокомпонентной плазмы. Используя результаты МД моделирования [438], в [443] предложена теоретическая модель, описывающая статическую проводимость полностью ионизованной плазмы, а также коэффициенты преломления, поглощения и отражения.

В работах Майорова, Яковенко и др. [391, 444–446], в которых метод МД называется также методом динамики многих частиц, были также получены термодинамические свойства неидеальной плазмы и распределение микрополей [444],

рассмотрены процессы диффузии и рекомбинации, распределение электронов по энергиям, включая связанные состояния [391,445], определена релаксация ультрахолодной плазмы к равновесию [446]. При этом авторы выступают с резкой критикой использования в МД моделировании неидеальной плазмы периодических граничных условий, включая схему Эвальда и метод ближайшего образа [447]. В то же время, предлагаемая ими модель системы с зеркально отражающими стенками имеет, очевидно, свои недостатки, заключающиеся в наличии приграничного слоя и необходимости усреднения исследуемых величины по внутренней области расчетной ячейки, имеющей переменное числом частиц. При недостаточном числе частиц в такой системе граничные эффекты вносят гораздо большие искажения в рассчитываемые величины, чем неявная отсечка потенциала на половине длины ячейки при использовании периодических граничных условий. Более подробно использование отражающих граничных условий в МД моделировании обсуждается в разделе 2.4.

В целом следует отметить, что метод МД оказался мощным инструментом, позволившим объяснить многие наблюдаемые явления в неидеальной плазме, такие как существование ленгмюровских плазменных волн, аномальную проводимость и отражательную способность, скорость рекомбинации и релаксации температур в ультрахолодной плазме, динамику кластерной наноплазмы и др. Основным недостатком этого метода является необходимость использования псевдопотенциалов межчастичного взаимодействия, выбор которых зачастую является предметом дискуссий. Влияние, например, отсечки потенциала электрон–ионного взаимодействия на близких расстояниях становится весьма существенным при температурах $T < 3 \cdot 10^4$ К и концентрациях электронов $n_e > 10^{21}$ см⁻³. Еще большей проблемой является описание связанных состояний электронов и ионов.

Большинство из используемых в МД псевдопотенциалов получены путем сопоставления суммы Слеттера, вычисленной в представлении классической и квантовой механики для равновесной системы из двух частиц. Выражения для этих потенциалов содержат температуру, т.е. термодинамический параметр, использование которого для описания микроскопических актов столкновений частиц, вообще говоря, не обосновано. Это вопрос становится особенно важным при описании систем вне термодинамического равновесия, для которых либо понятие

температуры неприменимо вообще (при отсутствии локального равновесия), либо температура компонент плазмы изменяется со временем. При этом использование в псевдопотенциале “мгновенной” температуры будет приводить к нарушению закона сохранения энергии.

Другим недостатком классической МД является невозможность учесть эффекты вырождения электронного газа, хотя, как будет показано в разделах 2.1 и 5.3, псевдопотенциальная модель может давать неожиданно хорошие результаты даже для частично вырожденной плазмы ($\theta < 1$).

В последнюю очередь следует отметить квадратичный рост объема вычислений в (1.25) при увеличении N , что ограничивает размер моделируемых систем. Это бывает существенно при рассмотрении процессов с большим характерным размером, например, ленгмюровских волн с большой длиной волны, либо пространственно неоднородных систем, например, кластерной плазмы. Частичное решение этой проблемы рассмотрено в разделе 1.3.3. Более точный учет квантово-механических эффектов взаимодействия частиц обсуждается в разделах 1.3.4, 1.3.5 и 1.3.6.

1.3.3. Методы частиц в ячейке и TreeMD

Зависимость результата МД моделирования от числа частиц в системе является существенной проблемой для многих из описанных выше задач. Эта проблема возникает, например, при исследовании плазмы с большим масштабом пространственной неоднородности: кластерной плазмы с количеством атомов более 10^4 или двойного электронного слоя. Размер системы также имеет значение при исследовании длинноволнового предела дисперсии и затухания плазменных волн, фазовых переходов (например, вигнеровской кристаллизации), а также плазмы с относительно низкой плотностью ($n_e \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$), где сфера дебаевского экранирования включает большое число частиц.

Как было отмечено ранее, увеличение числа частиц N в классическом МД алгоритме для расчета межчастичного взаимодействия (1.25) приводит к росту времени моделирования пропорционально $t \sim N^2$. При этом несложно показать, что на движение частицы в большей степени влияют ее ближайшие соседи, а взаи-

модействие с более удаленными частицами может быть определено приближенно без существенной потери точности расчетов, что позволило бы уменьшить объем вычислений.

Такой алгоритм был предложен в [448] и получил название TreeMD (молекулярная динамика с древовидной структурой хранения данных). Изначально этот метод был разработан для систем с гравитационным взаимодействием, и успешно используется до сих пор для решения задач астрофизики. Расчет взаимодействий на каждом шаге по времени состоит из двух этапов. На первом выполняется построение древовидной структуры данных для сортировки частиц по удаленности друг от друга, что и дает название методу. С использованием этой структуры на втором этапе определяются силы, действующие на каждую частицу, причем для ближайших соседей взаимодействие рассчитывается точно, а для более удаленных — заменяется на приближенный потенциал типа частица – группа частиц. Отношение размера группы s к расстоянию до нее d , при котором дальнейшее дробление группы на подгруппы прекращается, определяет ускорение по сравнению с обычной МД. Однако, при росте ускорения, растет и ошибка, вносимая приближенным характером учета дальних взаимодействий, поэтому выбор оптимального критерия для s/d является необходимым этапом настройки метода.

Главным достоинством алгоритма TreeMD является асимптотически более медленный рост времени расчета с увеличением числа частиц: $t \sim N \ln N$. При $N \gtrsim 10^4$ этот метод может давать заметные преимущества по сравнению с обычной МД, тем более, что для него в последнее время были созданы эффективные параллельные реализации [449].

С использованием алгоритма TreeMD в однородной неидеальной плазме исследовалось столкновительное (обратное тормозное) поглощение лазерного излучения [394], статическая проводимость [282] и другие явления. Однако, наиболее полезным он оказался для моделирования ионизованных кластеров и наноклапель [214, 411–413, 416, 419], причем в [416] с его помощью удалось рассмотреть систему из 10^7 частиц.

Другим методом, позволяющим моделировать системы заряженных частиц больших размеров является метод частиц в ячейке (метод крупных частиц, Particle-in-Cell, PIC) [450]. Этот метод и его электродинамическая модифика-

ция широко применяются для моделирования релятивистской лазерной плазмы, плазмы в токамаках, астрофизических объектах и других системах, в которых эффекты кулоновской неидеальности невелики [174, 178, 203, 208, 209]. В этом методе уравнения движения (1.25) решаются не для электронов и ионов, а для заряженных квазичастиц, взаимодействующих друг с другом посредством среднего поля.

Для расчета взаимодействий в методе PIC вводится одно-, двух- или трехмерная пространственная сетка на которой рассчитываются средние значения зарядов и токов, создаваемых квазичастицами. Далее на сетке численно решаются уравнения Пуассона или Максвелла (для электродинамической версии). Полученные сеточные значения электрического (и магнитного) поля используются для расчета сил, действующих на квазичастицы. Близкие столкновения либо не учитываются совсем (модель бесстолкновительной плазмы), что оправдано при высоких температурах, либо учитываются с помощью специального алгоритма Монте-Карло (Monte-Carlo collisions). Этот метод имеет ограниченное применение и для слабо-неидеальной плазмы (см., например, [451]), однако уступает по точности описания столкновительных процессов рассмотренным выше методам МД и МК.

В серии работ [247, 452–454] предложен комбинированный метод, названный MicPIC (Microscopic Particle-in-Cell), в котором уравнения движения (1.25), как и в классической МД, решаются для элементарных частиц. В пределах одной ячейки пространственной сетки частицы взаимодействуют друг с другом непосредственно с помощью псевдопотенциалов, а на больших расстояниях — как в методе PIC, посредством среднего поля. Этот метод похож на модификацию Particle-Particle Particle-Mesh (PPPM), но не использует концепцию квазичастиц. За счет этого его можно применять лишь для систем ограниченного размера (например, ионизированных нанокластеров), но точность описания столкновительных процессов по сравнению с PIC существенно возрастает. Похожий метод был использован также в [402].

Следует отметить, что оба описанных подхода TreeMD и MicPIC/PPPM имеют немало вычислительных особенностей и требуют тонкой настройки, однако в целом они позволяют преодолеть квадратичный рост времени вычислений с увеличением числа частиц, поэтому для моделирования систем с $N > 10^4$ их

применение вполне оправдано.

1.3.4. Метод квантовой молекулярной динамики, основанный на теории функционала плотности

Походы, основанные на формализме электронной плотности, уже обсуждались в разделе 1.2.4, однако, именно описанная ниже теория функционала плотности (ТФП, Density Functional Theory, DFT, Kohn-Sham DFT, KS-DFT) позволила создать эффективные численные алгоритмы для моделирования твердых тел, жидкостей, разогретого плотного вещества и наноразмерных систем, открыв тем самым новое прорывное направление в вычислительной физике и химии. История создания, основные положения и перспективы развития методов, основанных на ТФП, изложены в [455].

Основу ТФП заложили работы Хоэнберга, Кона и Шэма [456, 457], в которых было показано, что основное состояние квантовой системы однозначно определяется функцией электронной плотности, минимизирующей функционал полной энергии. Таким образом, уравнение Шредингера для нескольких взаимодействующих друг с другом электронов может быть сведено к более простому уравнению для одного электрона, находящегося в поле атомных ядер и среднего кулоновского поля, создаваемого остальными электронами (уравнение Кона-Шэма). Такая замена становится эквивалентной после эффективного учета обменно-корреляционного взаимодействия между электронами.

В общем виде уравнение Кона-Шэма [457] представляет собой одноэлектронное уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_h(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (1.35)$$

где $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ — внешний потенциал, $V_h(\mathbf{r}) = e^2 \int n(\mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| d^3\mathbf{r}'$ — энергия кулоновского взаимодействия электронов в одночастичном приближении (энергия Хартри), $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$ — потенциал обменно-корреляционного взаимодействия.

В простейшем случае (приближение локальной плотности, LDA) энергия обменно-корреляционного взаимодействия на один электрон может быть выражена

через некоторую функцию, зависящую от электронной плотности $\epsilon_{xc}(n)$:

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \left. \frac{d(n\epsilon_{xc}(n))}{dn} \right|_{n=n(\mathbf{r})}, \quad E_{xc}[n] = \int n(\mathbf{r})\epsilon_{xc}(n(\mathbf{r})) d^3\mathbf{r}, \quad (1.36)$$

где $E_{xc}[n]$ — обменно-корреляционный функционал, определяющий соответствующую поправку к энергии. Замыкание системы уравнений обеспечивается выражением $n(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2$, после чего она может быть решена итерационным способом.

Наибольшую трудность в методах, основанных на ТФП, представляет разработка модели обменно-корреляционного функционала. В рамках приближения локальной плотности для этого может быть использована модель однородного электронного газа, которая дает точное выражение для обменного взаимодействия, в то время как для корреляционного взаимодействия необходимы интерполяционные формулы. Создание таких формул в ранних работах по ТФП (см., например [458]) сделало возможным выполнение практически важных расчетов и широкое распространение метода.

Последующее развитие ТФП связано с разработкой обменно-корреляционных функционалов, зависящих от спина частиц [459, 460] и градиента электронной плотности [461], при этом часть моделей основана только на фундаментальных принципах, а другая часть использует полуэмпирический подход. Современные тенденции развития этих методов приведены в обзоре [462].

Решение уравнения (1.35) для многоэлектронных атомов может представлять большую вычислительную сложность, поэтому для них часто используются псевдопотенциалы [463, 464], позволяющие приближенно учесть влияние внутренних оболочек атома и проводить расчет волновой функции лишь для ограниченного числа электронов на внешних оболочках.

Практическая реализация алгоритмов, основанных на ТФП, требует также разложения волновой функции в некотором базисе. Для моделирования твердых тел, имеющих кристаллическую структуру, наиболее часто используется базис плоских волн [465]. При моделировании жидкости, плазмы или крупных молекулярных кластеров этот базис также применяется, так как он является осно-

вой многих современных программных пакетов, в том числе популярного пакета VASP [466], и в целом дает неплохие результаты, хотя в литературе представлены и другие варианты базисов [455].

Описанный выше алгоритм предназначен для лишь исследования статических свойств квантовых систем в основном состоянии. Следующим шагом на пути развития ТФП стало создание метода квантовой молекулярной динамики (КМД, QMD, Ab initio MD), в котором моделируется динамика ионов, погруженных в вырожденный электронный газ [467]. Согласно приближению Борна-Оппенгеймера состояние электронной подсистемы рассчитывается при неподвижных ионах. Для этого, как правило, используется ячейка с периодическими (блоховскими) граничными условиями. Полученная функция электронной плотности определяет силы, действующие на ионы в дополнение к их кулоновскому отталкиванию. Значения этих сил используются в уравнениях классической МД (1.25) для обновления положения ионов, после чего процедура итерационно повторяется.

В первых работах из-за недостатка вычислительной мощности использовался алгоритм “имитации отжига”, в котором релаксация функция электронной плотности и решение уравнений движения ионов выполнялись совместно (метод Кара-Паринелло [468]). Позже были реализованы алгоритмы, где минимум энергии для электронов достигается на каждом шаге ионной динамики. Для них иногда используется термин “молекулярная динамика в приближении Борна-Оппенгеймера” (Born–Oppenheimer MD, BOMD).

Следует подчеркнуть, что в исходной формулировке метода КДМ электронная подсистема, следуя за изменениями положения ионов, всегда находится в основном состоянии. В случае металлов такое приближение вполне оправдано, если рассматриваются температуры, значительно ниже температуры Ферми для электронов проводимости, а заселенность возбужденных состояний на внутренних оболочках невелика. При увеличении температуры, во-первых, перестает выполняться условие теоремы Хоэнберга-Кона и ТФП теряет свою математическую строгость, а во-вторых, перестают работать многие псевдопотенциальные модели, адаптированные лишь для описания электронов внутренних оболочек в основном состоянии. На заселенность возбужденных уровней может повлиять и увеличение давления, приводящее к изменению зонной структуры. Данный вопрос является

особенно важным в случае разогретого плотного вещества и неидеальной плазмы.

Обобщение ТФП на случай ненулевых температур рассмотрено в [469], где предложено перейти к минимизации функционала свободной энергии Гельмгольца. В дальнейшем этот метод получил название квантовой молекулярной динамики при конечных температурах (КМД-КТ, Finite-Temperature DFT, FT-DFT). Именно он, как отмечается в [470], стал наиболее используемым методом компьютерного моделирования разогретого плотного вещества. С его помощью исследованы ударные адиабаты и уравнение состояния, включая область предполагаемого фазового перехода, проводимость и отражательная способность в водороде [133, 134, 141, 143, 145, 159, 471–473], дейтерии [128, 133, 134, 474, 475], ксеноне [102–104] и других веществах. Кроме того, в разделе 1.1.2 уже упоминались работы по моделированию вещества в недрах планет солнечной системы, выполненные этим методом [40–42].

Метод ТФП позволяет рассматривать и неизотермические системы, в которых температура электронов существенно отличается от температуры ионов [476–480]. Как отмечалось в разделе 1.1.7, такие состояния возникают при воздействии коротких лазерных импульсов на вещество. Моделирование методом ТФП указало здесь на интересный эффект: при возбуждении электронной подсистемы стабильность ионной решетки может как уменьшаться, так и возрастать.

Неточность псевдопотенциальной модели становится существенной при повышении температуры до нескольких электрон-вольт. Например, в [478, 481] выявлены значимые различия между расчетами с помощью полноэлектронной (пакет FP-LMTO) и псевдопотенциальной (пакет VASP) моделей для алюминия, калия и вольфрама при $T \gtrsim 5$ эВ, а также при увеличении плотности.

При температурах свыше 10 эВ расчеты обычным методом КМД становятся слишком сложными с вычислительной точки зрения из-за необходимости учета большого количества возбужденных состояний электронов (время ортогонализации базиса растет как число состояний в кубе), а применение псевдопотенциалов — все менее обоснованным. Для моделирования таких состояний был предложен вариант метода “без орбиталей” (Orbital Free DFT, OFDFT), в котором электронная подсистема моделируется в рамках приближения Томаса-Ферми с обменно-корреляционными поправками, а динамика ионов рассчитывается так же, как в

исходном варианте КМД [482–485]. Этот подход хорошо работает в тех случаях, когда оболочечной структурой атомов можно пренебречь.

Расчет проводимости, диэлектрической проницаемости и отражательной способности в методе КМД, как правило, основан на теории линейного отклика и формуле Кубо-Гринвуда [102, 479, 486–488]. В [103, 104, 145] обсуждаются также поправки к продольной компоненте диэлектрической проницаемости, связанные с нелокальностью используемых в КМД псевдопотенциалов.

В исходном уравнении Кона-Шэма и рассмотренных его модификациях внешний потенциал $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ не зависит от времени, т.е. динамика электронов в явном виде не рассматривается — электронная подсистема всегда находится в состоянии локального равновесия. Обобщение уравнения Кона-Шэма на случай зависящего от времени потенциала $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ было выполнено в работе Рунге и Гросса [489], что привело к созданию динамического варианта метода, основанного на ТФП (КМД-ЗВ, Time-dependent DFT, TD-DFT). Этот метод оказался востребованным для изучения спектров поглощения атомов и молекул, кинетики химических реакций и других процессов, где возбужденные состояния электронов играют существенную роль [490].

Поскольку вычислительная сложность КМД-ЗВ существенно выше, чем для обычной КМД, его применение ограничено небольшими системами, содержащим десятиками атомов, а также временами 10-100 фс. В физике неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества этот метод применяется, например, для моделирования первичной ионизации нанокластеров, состоящих из нескольких десятков атомов, и формирования кластерной наноплазмы [491, 492], а также для исследования торможения ионов в плазме [493].

В целом возможности методов, основанных на ТФП, покрывают большой участок фазовой диаграммы. Их основное преимущество перед классическими МД и МК — это высокая точность описания квантово-механических эффектов: связанных состояний и вырождения электронов. Однако, в применении к задачам неидеальной электрон-ионной плазмы они ограничены областью температур до ~ 10 эВ и плотностью, близкой к твердотельной. Недостатком метода КМД является также высокая вычислительная сложность по сравнению с классической МД, что связано с асимптотической зависимостью времени выполнения расчета

от числа частиц $t \sim O(N^3)$. В настоящее время типичными являются расчеты с несколькими тысячами атомов для КМД. Исходная формулировка ТФП не позволяет рассматривать динамику электронов, а модификация КМД-ЗВ, в которой это возможно, обладает еще более низкой скоростью вычислений.

1.3.5. Методы Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям

Как было показано в предыдущем разделе, точность расчетов, основанных на ТФП, ухудшается по мере увеличения температуры и перехода от вырожденного электронного газа в разогретом плотном веществе к слабыврожденной электрон-ионной плазме. Для расчета равновесных свойств таких систем “из первых принципов” может быть использован метод Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (МКИТ, Path Integral Monte-Carlo, PIMC), который так же, как и метод функционала плотности, получил широкое распространение за последние 40 лет.

Этот метод оказался наиболее успешным для описания систем многих частиц с бозе-статистикой [494–496]. Его адаптация для систем фермионов оказалось более сложной, однако по мере развития вычислительной техники такие расчеты также стали возможными. Чтобы упростить изложение, рассмотрим основную идею этого метода на примере частиц без спина [31].

В координатном представлении статистическая сумма системы N частиц с координатами $\mathbf{R} = \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$ может быть записана как

$$Z = \int_{V^N} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle, \quad (1.37)$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона, $\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{H}}$ — оператор матрицы плотности, $\beta = 1/(k_B T)$. Другие термодинамические функции получают путем дифференцирования Z по переменным β и V [494]. Основной проблемой здесь является вычисление матричного элемента $\langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle$, в котором части оператора $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$, соответствующие кинетической \hat{K} и потенциальной энергии \hat{V} , не коммутируют.

Решением этой проблемы является использование высокотемпературного

приближения, в котором условие коммутации выполняется $e^{-\beta\hat{H}} \approx e^{-\beta\hat{K}}e^{-\beta\hat{U}}$, а для матричных элементов $\langle \mathbf{R} | e^{-\beta\hat{K}} | \mathbf{R} \rangle$ и $\langle \mathbf{R} | e^{-\beta\hat{U}} | \mathbf{R} \rangle$ могут быть получены аналитические выражения, становящиеся точными в пределе $\beta \rightarrow 0$ [142, 497].

Для перехода к высокотемпературному пределу используется групповое свойство операторов

$$\exp(-\beta\hat{H}) = \underbrace{\exp(-\Delta\beta\hat{H}) \dots \exp(-\Delta\beta\hat{H})}_n, \quad (1.38)$$

где $\Delta\beta = \beta/n$, а n — параметр модели. Негативным следствием этого преобразования является увеличение размерности интеграла (1.37):

$$Z = \int d\mathbf{R}^{(1)} \dots d\mathbf{R}^{(n)} \langle \mathbf{R}^{(1)} | e^{-\Delta\beta\hat{H}} | \mathbf{R}^{(2)} \rangle \dots \langle \mathbf{R}^{(n)} | e^{-\Delta\beta\hat{H}} | \mathbf{R}^{(1)} \rangle, \quad (1.39)$$

однако это не является препятствием для применения алгоритма Метрополиса, хорошо подходящего для вычисления многомерных интегралов (см. раздел 1.3.1).

Выражение (1.39) является аналогом использования фейнмановской формулировки квантовой механики [498], в которой статистическая сумма представляется в форме континуального интеграла по траекториям, проходящим через последовательность координат $\{\mathbf{R}^{(1)}, \dots, \mathbf{R}^{(n)}\}$. Переход к континуальному интегралу в данном случае обеспечивается устремлением n к бесконечности. Величину $i\beta$ можно также рассматривать как мнимое время, тогда разложение (1.38) соответствует разбиению интервала $0 < \tau < i\beta$ с шагом $\Delta\tau = i\Delta\beta$.

При моделировании неидеальной электрон–ионной плазмы методом МКИТ, ионы обычно рассматриваются как классические частицы, а статистическая сумма для электронного газа определяется выражением (1.39), модифицированным с учетом антисимметрии волновой функции электронов. Для системы из $N_e = N_e^\uparrow + N_e^\downarrow$ электронов, имеющих проекции спина вверх и вниз, соответствен-

но, оно принимает вид

$$Z = \frac{1}{(N_e^\uparrow! N_e^\downarrow!)^n} \int d\mathbf{R}^{(1)} \dots d\mathbf{R}^{(n)} \times \prod_{i=1}^n \left[\sum_{\sigma_i^\uparrow, \sigma_i^\downarrow} \text{sign}(\sigma_i^\uparrow) \text{sign}(\sigma_i^\downarrow) \langle \mathbf{R}^{(i)} | e^{-\Delta\beta\hat{H}} | \hat{P}_{\sigma_i^\uparrow} \hat{P}_{\sigma_i^\downarrow} \mathbf{R}^{(i+1)} \rangle \right], \quad (1.40)$$

где σ_i^\uparrow и σ_i^\downarrow обозначают все возможные наборы проекций спинов, $\hat{P}_{\sigma_i^\uparrow}$ и $\hat{P}_{\sigma_i^\downarrow}$ — операторы перестановки частиц, а $\mathbf{R}^{(n+1)}$ заменяется на $\mathbf{R}^{(1)}$.

Алгоритм расчета статистической суммы (1.40) был предложен в [494, 499]. В отличие от классического МК в методе МКИТ вводится два типа шагов: а) изменение координаты частицы $\mathbf{r}_j^{(i)}$; б) перестановка координат $\mathbf{r}_j^{(n)}$ и $\mathbf{r}_k^{(n)}$. Вероятности перехода вычисляются на основе модуля подынтегрального выражения (1.40), так как само это выражение является знакопеременным. С этим связана так называемая проблема знаков: попытка использования здесь алгоритма Метрополиса приводит к экспоненциальному росту погрешности определения статистических средних с ростом числа частиц [500, 501].

Проблема знаков является серьезным препятствием на пути практического применения метода МКИТ, особенно при низких температурах и больших плотностях (высокой степени вырождения электронов). Одно из ее решений предложено в [499], где сумма по знакопеременным членам заменяется детерминантом матрицы перестановок, хотя этот метод дополнительно увеличивает объем вычислений на каждом шаге. В некоторых работах этот вариант метода называется прямым МКИТ (Direct PIMC, DPIMC). С его помощью исследовались, например, уравнения состояния плотного водорода, дейтерия и гелия [497, 502, 503], а также фазовый переход в ударно-сжатом водороде [140, 142]. В [164] описано использование МКИТ совместно с вигнеровской квантовой динамикой для расчета проводимости плазмы.

Другим решением проблемы знаков является модификация метода МКИТ, в которой пространство координат \mathbf{R} разделяется на области положительно и отрицательно определенной матрицей плотности в зависимости от начальной конфигурации $\mathbf{R}^{(0)}$, а суммирование выполняется только по одной из этих обла-

стей [496, 504]. Этот метод получил название МКИТ с ограничениями (Restricted PIMC, RPIMC) и использован, например, в [505, 506] для моделирования плотного водорода и дейтерия, а также получил некоторое усовершенствование в работе [507]. Однако, как показано в [31], применение МКИТ с ограничениями может вносить непредсказуемую погрешность в результат вычислений из-за менее репрезентативной выборки начальных точек $\mathbf{R}^{(0)}$.

В [31] приведен подробный обзор этой и других модификаций метода МКИТ. В [508] приводится сопоставление результатов, полученных методами МКИТ и КДМ для широкого круга веществ.

В заключение отметим, что в отличие от ТФП исходный метод МКИТ не содержит дополнительных приближений и в пределе $n \rightarrow \infty$ является точным. Он имеет ограничения по температуре $T \gtrsim 1$ эВ, так как в при меньших T его вычислительная сложность существенно возрастает, в противоположность методам, основанным на ТФП, которые хорошо работают как раз в области низких температур. Вычислительная сложность МКИТ сильно зависит от числа частиц, поэтому он применяется в основном для моделирования наиболее легких элементов — водорода, дейтерия и гелия, а число электронов в расчетах не превышает $N_e \lesssim 100$. Тем не менее, в указанной области параметров результаты, полученные методом МКИТ, обеспечивают наибольшую точность учета квантово-механических эффектов, превосходящую точность моделирования методами КМД или классических МК и МД, поэтому в главе 5 они рассматриваются как эталонные.

Основываясь на алгоритме МД, метод МКИТ предлагается для расчета исключительно равновесных систем. Существует также и метод МД в терминах интегралов по траекториям (Path Integral Molecular Dynamics, PIMD) [509]. На данный момент его прямое применение для моделирования неидеальной плазмы не вполне возможно, однако в [156] описано использование комбинированного метода PIMD-DFT для исследования фазового перехода в дейтерии.

1.3.6. Метод молекулярной динамики с волновыми пакетами

Обзор численных методов, приведенный в разделах 1.3.1 – 1.3.5, показывает, что моделирование динамических и релаксационных процессов в неидеаль-

ной электрон–ионной плазме в диапазоне температур $(5 - 50) \cdot 10^3$ К и концентраций электронов $10^{19} - 10^{25}$ см $^{-3}$ представляет собой довольно сложную задачу, особенно если требуется рассмотрение систем с относительно большим числом частиц. Классический и квантовый методы Монте-Карло не позволяют рассматривать неравновесные системы. Метод классической МД недостаточно точно описывает образование связанных состояний при низких температурах и вырождение электронов при высоких плотностях, а используемые в нем псевдопотенциальные модели, как правило, содержат в качестве параметра температуру (см. раздел 1.2.2), что делает сомнительным их применимость вдали от состояния равновесия. Метод квантовой МД на основе ТФП позволяет моделировать лишь динамику ионов, а его модификация КМД-ЗВ ограничена возможностью расчетов с малым числом частиц и на коротких временах.

Одним из путей улучшить метод классической МД в области описания квантово-механических эффектов без критической потери численной эффективности является представление электронов в форме волновых пакетов. Эта модификация получила название метода молекулярной динамики с волновыми пакетами или метода динамики волновых пакетов (МДВП, Wave Packet Molecular Dynamics, WPMD). В данном разделе приведены лишь основные положения данного метода и направления его развития, более подробно практика применения МДВП обсуждается в главе 5.

Первое упоминание об использовании метода МДВП для моделирования неидеальной электрон–ионной плазмы можно найти в [378], более подробно этот метод излагается в [510]. Его идея состоит в параметризации волновой функции электрона гауссовским волновым пакетом

$$\varphi(\mathbf{x}) = \left(\frac{3}{2\pi s^2} \right)^{3/4} \exp \left\{ - \left(\frac{3}{4s^2} - \frac{ip_s}{2\hbar s} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{r})^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}) \right\}, \quad (1.41)$$

где зависящими от времени параметрами являются: положение центра пакета $\mathbf{r}(t)$, его “ширина” $s(t)$ и сопряженные с ними импульсы $\mathbf{p}(t)$, $p_s(t)$.

Многоэлектронная волновая функция в простейшем случае может быть пред-

ставлена в виде произведения Хартри

$$\Psi(\{\mathbf{x}_k\}) = \prod_{k=1}^{N_e} \varphi(\mathbf{x}_k). \quad (1.42)$$

Динамика электронов определяется эволюцией параметров волновых пакетов со временем, которую можно получить из вариационного принципа

$$\delta \int_0^t \left\langle \Psi \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right| \Psi \right\rangle dt = 0. \quad (1.43)$$

Как показано в [511,512], для определенного класса потенциалов взаимодействия, включая кулоновский, уравнения эволюции параметров волновых пакетов имеют вид уравнений Гамильтона

$$\frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_k}, \quad \frac{d\mathbf{p}_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_k}, \quad \frac{ds_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{s_k}}, \quad \frac{dp_{s_k}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial s_k}, \quad (1.44)$$

где $H = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$. Ионы в данной модели в силу их относительно большой массы считаются классическими частицами, для которых решаются уравнения движения (1.25).

Использование гауссовской формы волнового пакета (1.41) позволяет получить достаточно простые аналитические выражения для функции H (см. раздел 5.1). Таким образом, метод МДВП с вычислительной точки зрения оказывается практически эквивалентным классической МД и позволяет проводить расчеты для десятков тысяч частиц.

Аналогично методу динамики волновых пакетов может быть построен метод Монте-Карло для волновых пакетов (МКВП) на основе алгоритма Метрополиса (1.23), где вместо энергии (1.24) используется функция H . Этот метод может применяться для исследования равновесных систем, в частности, построения уравнений состояния неидеальной плазмы или расчета бинарных корреляционных функций.

Кулоновское взаимодействие электронов и ионов в операторе \hat{H} не требует отсечки на малых расстояниях, так как для ненулевой ширины пакета s устра-

няется расходимость потенциальной энергии в нуле. Таким образом, исходная формулировка метода МДВП не содержит подгоночных и иных параметров, а суть используемого приближения полностью определяется формой волнового пакета (1.41) и способом построения многоэлектронной волновой функции (1.42).

Данный метод был использован в [505, 510, 513–518] для моделирования неидеальной плазмы водорода в диапазоне температур $300 - 2 \cdot 10^5$ К. В [513, 516] показано хорошее согласие бинарных корреляционных функций, определенных методами МДВП и КМД для $T \geq 2000$ К, в [514, 515] с помощью МВДП рассмотрен процесс установления ионизационно-рекомбинационного равновесия и отмечается неплохое согласие полученной степени ионизации с аппроксимацией Паде, в [505] сопоставлены результаты МДВП и МКИТ для уравнения состояния ударно-сжатого водорода, в [518] обнаружено, что метод МДВП лучше, чем классическая МД, воспроизводит высокочастотную часть динамического структурного фактора в сравнении с теоретической асимптотикой для кулоновского взаимодействия. Однако, эти работы выявили и основные проблемы метода: неограниченное уширение (“расплывание”) волновых пакетов для свободных электронов, недостаточно точное описание низколежащих связанных состояний и отсутствие учета многочастичных квантовых эффектов. Рассмотрим эти проблемы подробнее.

Метод МДВП позволяет описывать как связанные, так и свободные состояния электронов, без явного разделения их, свойственного, например, химической модели. Однако, при использовании традиционных для семейства методов МД периодических граничных условий ширина волнового пакета, не локализованного в области притяжения ионов, неограниченно возрастает со временем [514]. Это, с одной стороны, является прямым следствием квантово-механических уравнений движения, но с другой стороны, представляет серьезную трудность для практической реализации метода. В системе с относительно малой концентрацией зарядов $n_e < 10^{20}$ см⁻³ и высокой температурой $T > 3 \cdot 10^4$ К ширины большинства волновых пакетов за короткое время достигают размеров расчетной ячейки, что фактически превращает систему в однокомпонентную плазму ионов на фоне “расплывшихся” делокализованных электронов. Зависимость средней ширины волновых пакетов от температуры и плотности плазмы представлена в [505].

Для решения этой проблемы в [516] было предложено добавить в гамильтони-

ан H дополнительное слагаемое $9\hbar^2 s_k^2 / (8m_e s_0^4)$, где s_0 — параметр, определяющий среднюю ширину пакетов для свободных электронов. Авторы [518] предлагали использовать значение $s_0 = 0.64\lambda_{\text{th}}$, где $\lambda_{\text{th}} = \hbar / \sqrt{m_e k_B T} = \lambda_e / \sqrt{2\pi}$. В результате добавления этого слагаемого ширина волнового пакета свободного электрона действительно оказывается ограниченной, однако выражение для s_0 снова возвращает нас к проблеме зависимости микроскопического потенциала взаимодействия от температуры. Подробнее этот метод обсуждается в разделе 5.1. В [311] показано, что аналогичный результат может быть получен без изменения гамильтониана, а лишь добавлением в пробную функцию (1.41) мнимого члена, пропорционального $i(\mathbf{x} - \mathbf{r})^4/s$, однако по сути это не решает указанной выше проблемы.

Проблема описания связанных состояний электронов состоит в том, что функция (1.41) недостаточно точно воспроизводит волновую функцию электрона в основном или возбужденных состояниях атомов или молекул. Так, например, минимальная энергия системы электрон–ион в методе МДВП достигается при ширине волнового пакета $1.628 a_B$ и составляет -11.55 эВ, что на 15% выше энергии основного состояния атома водорода -13.61 эВ. Энергия диссоциации модельной молекулы водорода в МДВП оказывается равной 2.91 эВ, что на 36% отличается от экспериментального значения 4.52 эВ. Эти отличия имеют значение при относительно низких температурах плазмы, где доля связанных состояний электронов высока.

Естественным решением здесь является увеличение числа параметров волнового пакета. В работах [519, 520], где с использованием МДВП исследовалась туннельная ионизация атомов водорода из основного состояния под воздействием короткого лазерного импульса, были предложены волновые пакеты эллиптической формы, а также линейная комбинация функций Гаусса–Эрмита. Это позволило повысить точность описания основного состояния, однако и внесло усложнения в численную модель.

Наконец, еще одним недостатком исходной формулировки метода МДВП является отсутствие учета многочастичных квантовых эффектов, таких как вырождение электронного газа и обменно-корреляционное взаимодействие. Для решения этой проблемы было предложено несколько решений. Одно из них заключается в представлении многочастичной волновой функции в виде произведения

функций для электронов с проекцией спина вверх и вниз

$$\Psi(\{\mathbf{x}_k\}) = \Psi^\uparrow(\{\mathbf{x}_k\}) \Psi^\downarrow(\{\mathbf{x}_k\}), \quad (1.45)$$

с последующей антисимметризацией каждой из них

$$\Psi^{\uparrow\downarrow}(\{\mathbf{x}_k\}) = \frac{1}{\sqrt{N_e^{\uparrow\downarrow}! \det(\mathbf{O})}} \sum_{\sigma \in \mathcal{P}} \text{sign}(\sigma) \prod_{k=1}^{N_e^{\uparrow\downarrow}} \varphi_{\sigma_k}(\mathbf{x}_k), \quad (1.46)$$

где \mathbf{O} — матрица перекрытий $o_{kl} = \langle \varphi_k | \varphi_l \rangle$, $N_e^{\uparrow\downarrow}$ — количество электронов с проекцией спина вверх или вниз (обычно $N_e^\uparrow = N_e^\downarrow = N_e/2$), \mathcal{P} — множество перестановок порядка $N_e^{\uparrow\downarrow}$. Проекция спина для каждого электрона определяется изначально и не изменяется в процессе расчета.

Математический аппарат для этой модели изложен в [521], а реализация алгоритма для моделирования неидеальной плазмы описана в [517]. Полученный метод МДВП с антисимметризацией (МДВПА) позволяет отчасти учесть эффекты вырождения электронов и обменного взаимодействия, однако для сохранения нормировки полной волновой функции теперь на каждом шаге моделирования требуется расчет норм-матрицы

$$\mathbf{N}_{q_a, q_b} = \frac{\partial}{\partial q_a^*} \frac{\partial}{\partial q_b} \ln \langle \Psi(\mathbf{q}) | \Psi(\mathbf{q}) \rangle, \quad (1.47)$$

где $\mathbf{q} = \{\mathbf{r}_k(t), s_k(t), \mathbf{p}_k(t), p_{s_k}(t)\}$ — вектор параметров волновых пакетов, а индексы a, b с учетом 8-ми скалярных параметров на электрон пробегают значения $1 \dots 8N_e^{\uparrow\downarrow}$. Уравнения изменения параметров волновых пакетов со временем (аналог уравнений движения (1.44)) в матричной форме принимают вид

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{N}^{-1} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}. \quad (1.48)$$

Недостаток этого метода состоит в том, что расчет матричных элементов $H = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ и их производных, вычисление норм-матрицы, а также ее инвертирование, как будет показано в разделе 5.3, требуют больших вычислительных

затрат. Тем не менее, в [517, 522, 523] этим методом удалось провести моделирование плотного водорода, хотя впоследствии оказалось, что полученные результаты для адиабаты Гюгонио разошлись с основным набором экспериментальных данных и расчетами, выполненными более точными квантово-механическими методами [524]. Возможно, эти различия связаны с искусственным ограничением ширины волновых пакетов, о котором было сказано выше.

Необходимость создания более эффективного с вычислительной точки зрения алгоритма, который учитывал бы многочастичные квантовые эффекты, привела к созданию метод силового поля для электронов (СПЭ, Electron Force Field, eFF) [525, 526]. По сути этот метод является модификацией исходного алгоритма МДВП, в котором к энергии парного взаимодействия электронов добавляется поправка, отвечающая за учет обменно-корреляционного взаимодействия. Эта поправка рассчитывается отдельно для сонаправленных $E^{\uparrow\uparrow}$ и разнонаправленных $E^{\uparrow\downarrow}$ проекций спинов взаимодействующих электронов, которые так же, как и в методе МДВПА, присваиваются электронам в начале расчета

$$\begin{aligned}
 E_{kj}^{\uparrow\uparrow} &= \left(\frac{S_{kj}^2}{1 - S_{kj}^2} + (1 - \rho) \frac{S_{kj}^2}{1 + S_{kj}^2} \right) \Delta T_{kj}, \\
 E_{kj}^{\uparrow\downarrow} &= \rho \frac{S_{kj}^2}{1 + S_{kj}^2} \Delta T_{kj}, \\
 \Delta T_{kj} &= \frac{\hbar^2}{m_e} \left[\frac{3}{6} \left(\frac{1}{\bar{s}_k^2} + \frac{1}{\bar{s}_j^2} \right) - \frac{6(\bar{s}_k^2 + \bar{s}_j^2) - 4\bar{r}_{kj}^2}{(\bar{s}_k^2 + \bar{s}_j^2)^2} \right], \\
 S_{kj} &= \left(\frac{2}{\bar{s}_k/\bar{s}_j + \bar{s}_j/\bar{s}_k} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{\bar{r}_{kj}^2}{\bar{s}_k^2 + \bar{s}_j^2} \right], \tag{1.49}
 \end{aligned}$$

где $\rho = 0.2$ — параметр модели, $\bar{s}_k = 0.9\sqrt{4/3} s_k$, $\bar{r}_{kj} = 1.125|r_k - r_j|$.

Эта модель является менее точной чем МДВПА, так как остается в рамках приближения парного взаимодействия и, кроме того, содержит ряд подгоночных параметров. В то же время быстродействие данного метода сравнимо с быстродействием МДВП без антисимметризации, так как уравнения движения сохраняют исходный вид ((1.44)) и не требуется трудоемкого вычисления норм-матрицы. За счет вариации параметров и введения различного типа волновых пакетов для s

и р оболочек метод СПЭ может использоваться для достаточно широкого ряда химических элементов, тогда как МДВП/МДВПА на данный момент редко применяется для элементов тяжелее гелия. Популярность этой модели также связана с ее интеграцией в популярный пакет МД моделирования LAMMPS [527]. С ее помощью, например, в [528] исследовался фазовый переход в водороде при высоких давлениях с учетом неравновесных состояний.

Несмотря на описанные недостатки, семейство методов МДВП имеет очевидные преимущества по сравнению с классической МД и другими описанными ранее методами моделирования неидеальной плазмы. В главе 5 рассмотрены способы преодоления каждого из описанных недостатков метода МДВП, а также предложена новая модификация этого метода, которая включая в себя расчет обменно-корреляционной энергии на основе ТФП.

1.4. Выводы к первой главе

Исследования неидеальной электрон–ионной плазмы и разогретого плотного вещества необходимы для понимания процессов в естественных условиях и лабораторных исследованиях, связанных с получением экстремальных состояний веществ при высоких температурах и давлениях. На данный момент накоплен большой массив экспериментальных данных, полученных из наблюдений за астрофизическими объектами, экспериментов по воздействию на конденсированные и газовые мишени мощных ударных волн, взаимодействию фемтосекундных лазерных импульсов и потоков заряженных частиц с конденсированными мишенями, в том числе нанометрового размера, сжатию вещества в алмазных наковальнях, электровзрыву проводников, изучению электрических разрядов в вакууме и в плотных средах, созданию ультрахолодной плазмы и др. Отдельное место занимают исследования неидеальной плазмы водорода и гелия, однако даже для этих простых веществ разработка теоретических моделей сталкивается с существенными трудностями, связанными с а) учетом столкновений частиц с рассеянием на большие углы (сильных столкновений), б) описанием коллективных эффектов движения частиц в условиях неидеальности плазмы, в) учетом эффектов частичного вырождения электронного газа и других многочастичных квантовых эффектов,

г) описанием связанных состояний электронов и ионов, процессов ионизации и рекомбинации с учетом фактического распределения микрополей в плазме.

Для решения указанных задач большое значение играет развитие методов компьютерного моделирования, основанных на современных представлениях о строении вещества и моделях межчастичного взаимодействия. Среди них можно выделить методы атомистического моделирования, основанные на непосредственном расчете движения атомов, молекул, электронов и ионов. В их числе методы классической молекулярной динамики и Монте-Карло с различными модификациями, метод квантовой молекулярной динамики, основанный на теории функционала плотности, метод Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям, а также метод молекулярной динамики с волновыми пакетами.

Каждый из этих методов имеет определенную область применения и не является универсальным. Например, методы классической МД и МК позволяют моделировать относительно большие области плазмы, исследовать пространственно неоднородные и неравновесные среды, хорошо подходят для описания коллективных процессов, таких как плазменные волны и колебаний в пространственно-ограниченной плазме. В то же время они недостаточно точно описывают квантово-механические эффекты образования связанных состояний, вырождения электронного газа и обменно-корреляционного взаимодействия. Кроме того, они базируются на псевдопотенциальной модели, которая во многих случаях является слишком грубым приближением для описания взаимодействия частиц. В свою очередь метод квантовой МД хорошо описывает конденсированные состояния и разогретое плотное вещество, но плохо применим в области разреженной плазмы и высоких температур, а также не предназначен для моделирования совместной динамики электронов и ионов. Метод МКИТ обладает высокой точностью моделирования термодинамических свойств равновесной электрон–ионной плазмы и практически не содержит априорных параметров, т.е. является в наибольшей степени первопринципным, однако он обладает большой вычислительной сложностью, не позволяет использовать большое число частиц и моделировать неравновесные состояния. Таким образом, дальнейшее развитие методов компьютерного моделирования неидеальной электрон–ионной плазмы представляется актуальной задачей.

Глава 2

Динамическая проводимость неидеальной электрон–ионной плазмы

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. Кроме того, эти величины содержат информацию о колебательных и столкновительных процессах в плазме.

В данном разделе обсуждаются особенности расчета статической и динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы методом классической молекулярной динамики. При этом большое внимание уделяется методическим вопросам использования различных типов граничных условий, определения “внешней” и “внутренней” проводимости, влияния формы потенциала межчастичного взаимодействия. Результаты МД расчетов сопоставляются с различными теоретическими и экспериментальными работами.

2.1. Статическая проводимость

2.1.1. Теоретические модели статической проводимости неидеальной плазмы

Выражение для проводимости идеальной (дебаевской) плазмы в статическом пределе, связывающей плотность тока с постоянным электрическим полем, приложенным к среде, получено в теоретических работах Ландау и Спитцера [89, 108]

$$\sigma_{\text{dc}}^{\text{LS}} = \frac{4\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} \frac{(k_{\text{B}}T)^{3/2}}{Ze^2m^{1/2}\Lambda}, \quad (2.1)$$

где кулоновский логарифм Λ определяется отношением максимального и минимального углов рассеяния или межчастичных расстояний, выбранных в качестве пределов интегрирования при определении транспортного сечения рассеяния электронов на ионах. В [89] в качестве таких расстояний при температурах

$k_B T \ll m_e e^4 / (3\hbar^2)$ предлагается использовать дебаевский радиус и длину Ландау $\Lambda = \ln(r_D/r_L) = \frac{1}{2} \ln(1/(6\Gamma^3))$.

Выражение (2.1) получено в приближении лоренцевой плазмы, в которой электрон–электронные столкновения не учитываются, а электрон–ионные столкновения считаются слабыми (с рассеянием на малые углы). Кроме того, не учитывается влияние связанных состояний электронов и ионов, а также недебаевский характер экранировки частиц в неидеальной плазме (выражение r_D/r_L при увеличении плотности становится меньше единицы). Это делает формулу (2.1) неприменимой при $\Gamma \gtrsim 0.2$.

Теоретическая оценка влияния эффектов неидеальности на статическую проводимость плазмы выполнена в работах [288–291]. Так [288] использована упрощенная модель экранированного потенциала взаимодействия

$$V_{ei}^{\text{src}}(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r < a, \\ -Ze^2/a, & r \geq a, \end{cases} \quad (2.2)$$

где эффективный радиус экранирования a скорректирован с учетом неидеальности плазмы. В результате было получено выражение для приведенной статической проводимости σ/σ_0 , где σ_0 — проводимость идеальной плазмы, зависящее только от безразмерного параметра Γ или N_D , т.е. обладающее свойствами подобия, которое удовлетворительно описывало экспериментальные данные при $N_D \geq 1$.

В [289] рассматривается влияние на проводимость парных электрон-ионных корреляций, приводящих к образованию атомов в основном и возбужденном состоянии, столкновительных комплексов, а также промежуточных квазисвязанных состояний. В [290, 291] для оценки эффективного радиуса экранирования в потенциале (2.2) рассматривается перекрытие “кулоновских воронок” от соседних ионов и понятие локализованных электронов. Кроме того, проведена оценка влияния рассеяния электронов на тепловых плазменных колебаниях. В результате авторами предложена следующая интерполяционная формула для статической

проводимости в диапазоне параметра неидеальности $\gamma = 0.1 - 1$ ($\Gamma = 0.13 - 1.28$):

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{dc}}^{\text{VK}} &= 2 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{(k_{\text{B}}T)^{3/2}}{m^{1/2}e^2} \sigma^*, \\ \sigma^* &= \frac{1 - (1 - \exp(-\pi^2\gamma^2)) \exp(-2\gamma)}{\alpha_{\text{E}}^{-1} \ln \sqrt{\frac{9}{4}\pi\gamma^3 + 1 + 16b(1 + b\gamma^{3/2})/\pi}},\end{aligned}\quad (2.3)$$

где $b = 0.17$, $\alpha_{\text{E}} = 0.582$, $\gamma = (2\pi/3)^{-1/3} \Gamma$.

Еще одно теоретическое выражение для проводимости было получено в [293], где был учтен вклад электрон-электронных столкновений в рамках приближения Спитцера-Хэрма, а также предложено новое значение кулоновского логарифма на основе модели [529]. Данная модель была разработана изначально для расчета силы увлечения ионов в пылевой плазме и учитывает зависимость сечения столкновения электронов с ионами от распределения скоростей налетающих частиц. Окончательное выражение в безразмерных единицах имеет вид

$$\frac{\sigma_{\text{dc}}^{\text{Kh}}}{\omega_{\text{p}}} \simeq \frac{0.34}{\Gamma^{3/2}\Lambda_{\text{mod}}}, \quad \Lambda_{\text{mod}} = 3 \left(\int_0^{\infty} \frac{x^7 e^{-x^2} dx}{\ln \left(1 + \frac{2x^2}{\sqrt{3}\Gamma^3} \right)} \right)^{-1}. \quad (2.4)$$

Взаимодействие электронов с ионами в данной модели считалось кулоновским, квантовые поправки не учитывались.

Проводимость неидеальной плазмы исследовалась также на основе обобщенной теории линейного отклика и аппарата функций Грина с учетом корреляций частиц (плазменного микрополя), сильных столкновений и вырождения электронного газа при высоких плотностях [279,280]. На основе этой модели была получена еще одна интерполяционная формула [285], связывающая между собой аналити-

ческие решения для различных предельных случаев

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\text{dc}}^{\text{ERR}} &= a_0 T^{3/2} \left(1 + \frac{b_1}{\Theta^{3/2}} \right) \left[D \ln(1 + A + B) - C - \frac{b_2}{b_2 + \Gamma \Theta} \right]^{-1}, \\
 A &= \Gamma^{-3} \frac{1 + a_4/\Gamma^2 \Theta}{1 + a_2/\Gamma^2 \Theta + a_3/\Gamma^4 \Theta^2} \left[a_1 + c_1 \ln(c_2 \Gamma^{3/2} + 1) \right]^2, \\
 B &= b_3(1 + c_3 \Theta)/\Gamma \Theta / (1 + c_3 \Theta^{4/5}), \\
 C &= c_4 / (\ln(1 + \Gamma^{-1}) + c_5 \Gamma^2 \Theta), \\
 D &= (\Gamma^3 + a_5(1 + a_6 \Gamma^{3/2})) / (\Gamma^3 + a_5).
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Входными данными для этой формулы являются безразмерные параметры неидеальности Γ и вырождения Θ , а также температура T в Кельвинах, результат выражается в $(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$. Набор аппроксимационных параметров задается величинами $a_0 = 0.03064$, $a_1 = 1.1590$, $a_2 = 0.698$, $a_3 = 0.4876$, $a_4 = 0.1748$, $a_5 = 0.1$, $a_6 = 0.258$, $b_1 = 1.95$, $b_2 = 2.88$, $b_3 = 3.6$, $c_1 = 1.5$, $c_2 = 6.2$, $c_3 = 0.3$, $c_4 = 0.35$, $c_5 = 0.1$.

В пределе низкой плотности формула (2.5) переходит в выражение (2.1), а в пределе вырожденной плазмы — в формулу Займана для металлов [294], однако в промежуточной области, особенно при больших значениях Γ , аналитические расчеты носят довольно приближенный характер, поэтому здесь важную информацию для проверки этой формулы может дать компьютерное моделирование.

2.1.2. Расчет статической проводимости на основе МД моделирования

Для невырожденной плазмы, как было отмечено ранее, наиболее простым и эффективным методом моделирования динамики электронов и ионов в неидеальной плазме является классическая МД. Ниже будет показано, что при подходящем выборе потенциала взаимодействия, классическая МД дает неплохой результат и для плазмы формально за границей вырождения.

Для расчета проводимости методом МД обычно используется теория линейного отклика. Этот метод описан еще в первых работах по МД моделирова-

нию [356, 362]. Сначала рассчитывается автокорреляционная функция тока (АФТ)

$$K_{jj}(t) = \frac{\langle \mathbf{j}(t) \mathbf{j}(0) \rangle}{\langle \mathbf{j}^2 \rangle}, \quad \mathbf{j}(t) = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i(t), \quad (2.6)$$

где \mathbf{v}_i и q_i — скорости и заряды частиц (электронов и ионов), \mathbf{j} — суммарная плотность тока, L — длина стороны кубической расчетной ячейки, $N = N_e + N_i$. Усреднение выполняется по начальным моментам времени $\mathbf{j}(0)$, причем, как правило, с перекрытием временных интервалов для параллельно рассчитываемых корреляторов. Также возможно усреднение по независимым МД траекториям.

Статическая проводимость определяется интегрированием АФТ для проекции плотности тока j^z по времени:

$$\sigma_{\text{dc}}^{\text{MD}} = \beta L^3 \int_0^{\infty} \langle j^z(t), j^z(0) \rangle dt = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \int_0^{\infty} K_{jj}(t) dt. \quad (2.7)$$

Здесь использовано выражение для среднего значения тока с учетом анизотропии плазмы

$$\langle j^z(t), j^z(0) \rangle = \frac{1}{3} \langle \mathbf{j}(t) \mathbf{j}(0) \rangle, \quad \langle \mathbf{j}^2 \rangle = \frac{3\omega_p^2}{4\pi L^3 \beta}. \quad (2.8)$$

В [95, 443] и других работах показывается, что результаты МД моделирования для АФТ в области слабонеидеальной плазмы $\Gamma < 1$ хорошо аппроксимируются экспоненциальной зависимостью $K_{jj}(t) = e^{-\nu t}$. Эта модель соответствует известной формуле Друде (1.6). К примеру, на ее основе в [443] из результатов МД моделирования ультрахолодной плазмы получено полуэмпирическое соотношение $\nu \approx 0.37\Gamma$, которое затем используется для расчета коэффициентов преломления, поглощения и отражения лазерного излучения. Однако, мы не будем пользоваться этим упрощением, т.е. интегрирование в (2.7) будет выполняться численно на основе фактических результатов МД.

Здесь и далее в данной главе рассматривается моделирование системы электронов и однократно заряженных ионов. Взаимодействие частиц описывается потенциалом Кельбга с учетом усреднения по спинам (1.18). Ранее было показано, что масса ионов достаточно слабо влияет на проводимость плазмы при отноше-

нии масс ионов и электронов $m_i/m_e \gtrsim 100$ [95]. В то же время уменьшение массы ионов увеличивает их тепловую скорость и тем самым улучшает усреднение по конфигурациям ионов вдоль одной МД траектории, поэтому в описанных ниже расчетах используется модельное соотношение масс $m_i/m_e = 100$.

Для решения уравнений движения (1.25) применяется схема с перешагиванием (Leap-frog) второго порядка точности. Шаг интегрирования по времени выбирается таким образом, чтобы полная энергия системы сохранялась с точностью не хуже 0.1 % (более подробно о сохранении энергии см. [388]). При расчете сил, действующих на частицы, находящиеся в кубической ячейке, применяются периодические граничные условия (метод ближайшего образа).

Выбор числа частиц определяется в данном случае эффективным радиусом экранирования r_{scr} , который не должен превышать длину стороны расчетной ячейки L . Однако, величина r_{scr} априори неизвестна, поэтому оптимальное число частиц подбирается, как правило, экспериментально, путем сравнения результатов для N и $2N$. Выбор слишком большого значения N существенно замедляет работу программы, так как время расчета межчастичных взаимодействий растет пропорционально N^2 . При этом увеличение N с целью повышения объема усреднений неэффективно, т.к. тот же эффект может быть достигнут увеличением длины траектории или параллельным расчетом нескольких траекторий, см. [530]. Подробнее зависимость термодинамических величин от числа частиц обсуждается в разделе 2.4.

Параметры плазмы, для которых проводилось моделирование, показаны в таблице 2.1. Для каждого набора параметров приведено также выбранное число частиц и значение шага интегрирования. Как видно из таблицы, за счет увеличения r_{scr} при меньшей неидеальности требуется большее N . Оптимальное значение шага по времени зависит от концентрации электронов примерно как $\Delta t \sim n_e^{-\alpha}$, где $\alpha = 0.6 - 1$.

Моделирование начиналось с произвольного распределения частиц в кубической ячейке. С помощью термостата Ланжевена проводилось термостатирование системы до достижения равновесия на требуемой температуре T . После установления равновесия термостат отключался, и основная часть МД траектории рассчитывалась для изолированной системы. Полное число шагов на равновесной

Таблица 2.1. Параметры плазмы и результаты расчета статической проводимости: T и n_e — температура плазмы и концентрация электронов, Γ и Θ — параметры неидеальности и вырождения, N — суммарное число электронов и ионов, Δt — шаг интегрирования по времени, σ/ω_p — нормированная статическая проводимость.

№	$T, 10^3 \text{ К}$	$n_e, 10^{21} \text{ см}^{-3}$	Γ	θ	N	$\Delta t, 10^{-18} \text{ с}$	σ/ω_p
1	33	0.00385	0.128	317.4	1600	567.5	1.79 ± 0.12
2	33	0.0308	0.256	79.4	1600	120.4	1.02 ± 0.07
3	33	0.481	0.64	12.7	500	15.2	0.44 ± 0.02
4	33	3.85	1.28	3.17	236	4.49	0.31 ± 0.01
5	33	13.0	1.92	1.41	128	1.17	0.35 ± 0.01
6	33	30.8	2.56	0.79	128	0.508	0.36 ± 0.02
7	33	104.0	3.84	0.35	128	0.138	0.79 ± 0.02
8	33	246.5	5.12	0.20	128	0.0337	1.23 ± 0.07

части МД траектории составляло $(1 - 25) \cdot 10^6$, что соответствует модельному времени расчета 0.7 пс – 2 нс. Усреднение АФТ (2.6) проводилось по $2 \cdot 10^3 - 5 \cdot 10^5$ начальным конфигурациям вдоль траектории, из которых не менее $200 - 5 \cdot 10^4$ статистически независимы. Полученные результаты уточняют и дополняют расчеты [95], проведенные для меньшего диапазона Γ и с меньшим объемом усреднений.

Результаты расчетов статической проводимости показаны в таблице 2.1 и на рисунке 2.1 вместе с экспериментальными данными и указанными выше теоретическими моделями. Экспериментальные точки получены на основе выделения кулоновской части проводимости, проведенного в [356]. Из рисунка видно, что формула (2.1) становится неприменимой при $\Gamma > 0.1$, а формулы (2.3) – (2.5), экспериментальные данные, результаты МД моделирования для ультрахолодной плазмы [438] и настоящей работы достаточно хорошо совпадают друг с другом в диапазоне $\Gamma = 0.1 - 1$. Исключением являются лишь результаты более ранних расчетов [362], недостаточная точность которых, по-видимому, была связана с малым объемом статистического усреднения. Сдвиг всего массива экспериментальных данных относительно теоретических оценок (2.3), (2.5) и результатов моделирования в сторону меньшей проводимости, по мнению авторов [356], может объясняться неравновесным состоянием плазмы и возбуждением надтепловых плазменных колебаний.

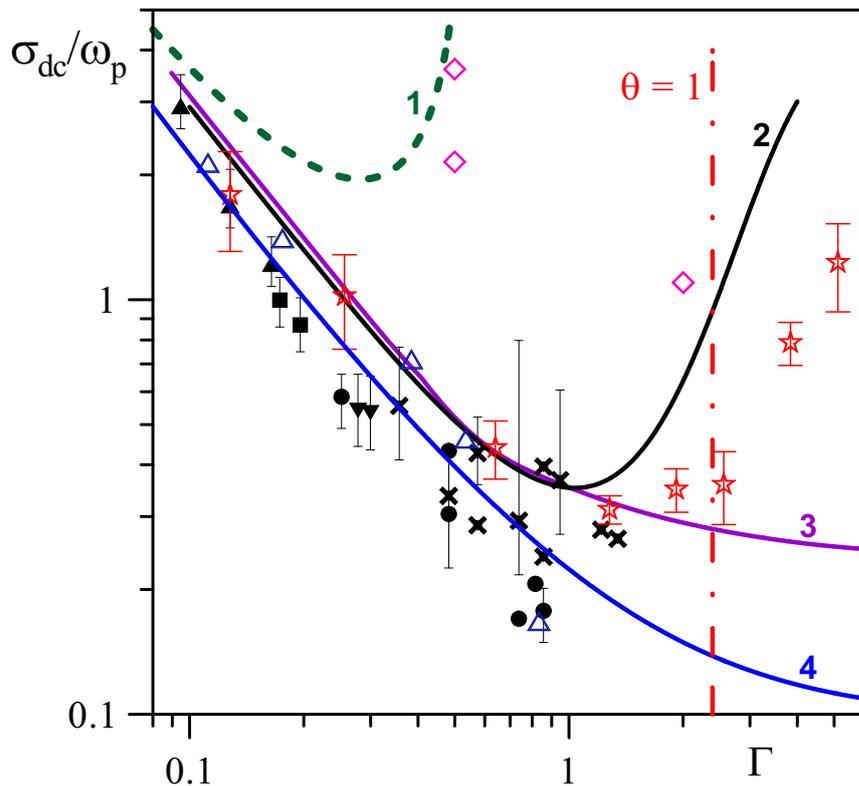


Рис. 2.1. Статическая проводимость плазмы в зависимости от параметра неидеальности. Теоретические кривые: 1 — формула Ландау-Спитцера (2.1), 2 — интерполяционная формула (2.5), 3 — интерполяционная формула (2.3), 4 — теоретическая модель (2.4); экспериментальные данные: ● — [531], × — [85], ■ — [532], ▲ — [533], ▼ — [534]; результаты МД моделирования: ◇ — [362], △ — [438], ☆ — настоящая работа (потенциал (1.18), $T = 33000$ К).

В области $\Gamma > 1$ большое значение начинают играть квантовые эффекты электрон-ионного взаимодействия, а также эффекты вырождения электронного газа (параметр вырождения θ для выбранной температуры $T = 33000$ К достигает единицы при $\Gamma = 2.39$). Следствием этого являются различия между кривой 2 и кривыми 3, 4 на рисунке 2.1, так как модели, соответствующие кривым 3, 4, не учитывают указанные квантовые эффекты. По той же причине, по-видимому, различаются результаты МД моделирования ультрахолодной плазмы [438], где использовался глубокий кулоновский потенциал, и настоящей работой, где использовался уточненный потенциал Кельбга с квантовыми поправками.

Интересно отметить, что несмотря на некоторое ухудшение согласия между кривой 3 и расчетами с потенциалом Кельбга, результаты МД правильно воспроизводят характер зависимости и дают вполне приемлемый результат далеко за границей формальной области применимости классической МД (см. значения θ в таблице 2.1). Такая же ситуация возникает при моделировании термодинамиче-

ских свойств (см. раздел 5.3). Это говорит о том, что основанный на квантовой статистике псевдопотенциал (1.18) позволяет использовать классическую МД для моделирования слабыврожденной плазмы, хотя точность этого моделирования, конечно, уступает методам квантовой МД и МКИТ.

Поскольку форма потенциала Кельбга зависит от температуры, важно понять, насколько эта зависимость отражается на характере столкновений частиц, причем, в первую очередь играют роль электрон-ионные столкновения. Для этого были проведены расчеты в широком диапазоне температур при постоянном значении параметра неидеальности, см. таблицу 2.2. Изменение формы потенциала в этом диапазоне показано на рисунке 2.2. Из таблицы видно, что глубина потенциала e - i взаимодействия при таком изменении температуры меняется примерно в 3.5 раз.

Таблица 2.2. Зависимость глубины псевдопотенциала (1.18) и эффективной частоты столкновений ν от параметров плазмы: T и n_e — температура плазмы и концентрация электронов, Γ и Θ — параметры неидеальности и вырождения, $V_{ei}(0)$ и $V_{ee}(0)$ — значения потенциала при $r \rightarrow 0$ для e - i и e - e взаимодействий, ν — эффективная частота столкновений при $\omega = 0$, α_r и α_i — показатели высокочастотной асимптотики $\nu(\omega)$.

№	$T, 10^3 \text{ К}$	$n_e, 10^{21} \text{ см}^{-3}$	Γ	Θ	$\beta V_{ei}(0)$	$\beta V_{ee}(0)$	ν/ω_p	α_r	α_i
1	16	0.2096	1.0	10.71	-8.52	7.49	0.224	3.44	1.05
2	33	1.839	1.0	5.20	-6.83	5.61	0.221	3.79	1.05
3	100	51.17	1.0	1.71	-4.49	3.64	0.150	3.52	1.04
4	350	2194	1.0	0.49	-2.49	2.31	0.032	3.35	1.02

Напомним, что по формуле (2.3) проводимость зависит только от Γ , в то время как выражение (2.5) описывает зависимость от Γ и θ . На рисунке 2.3 и в таблице 2.2 представлена зависимость эффективной частоты столкновений $\nu = \omega_p^2/(4\pi\sigma_{dc})$, полученная из МД моделирования. График показывает, что эта зависимость довольно существенна в области высоких температур, при этом результаты МД хорошо совпадают с формулой (2.5). Величины α_r и α_i обсуждаются в подразделе 2.3.4.

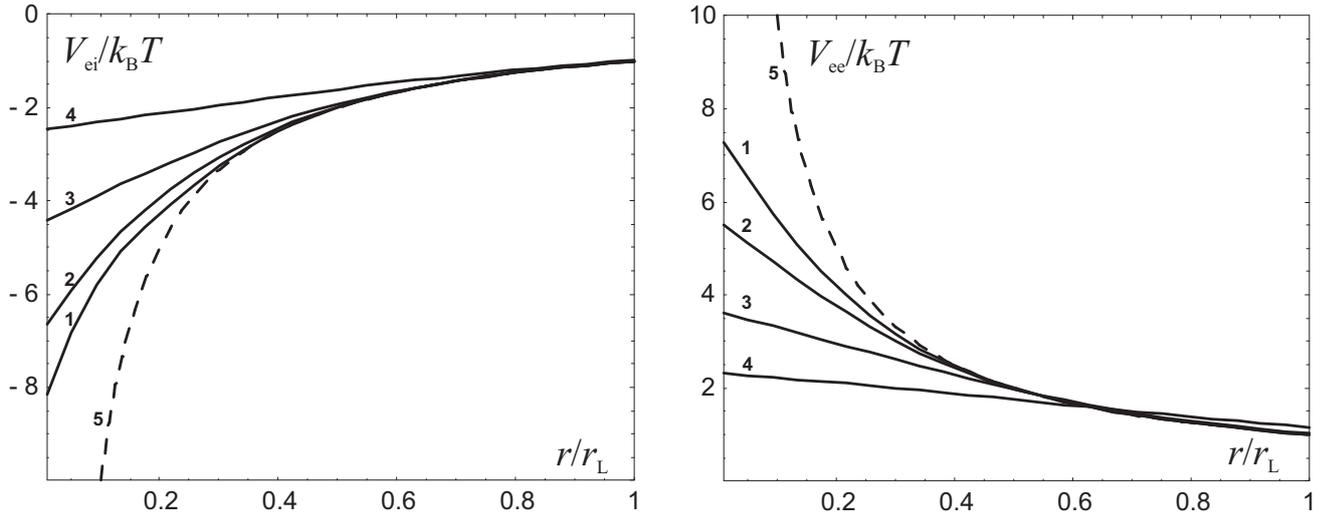


Рис. 2.2. Вид псевдопотенциала (1.18) для электрон–ионного (слева) и электрон–электронного (справа) взаимодействий в зависимости от температуры: 1 — $1.6 \cdot 10^4$ К, 2 — $3.3 \cdot 10^4$ К, 3 — 10^5 К, 4 — $3.5 \cdot 10^5$ К, 5 — кулоновский потенциал.

2.2. Динамическая проводимость и эффективная частота столкновений

В общем случае тензор диэлектрической проницаемости плазмы ε_{ij} зависит от частоты возмущающего поля ω и волнового вектора \mathbf{k} . Для изотропной среды его можно представить в виде суммы продольной ε^L и поперечной ε^T диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon^L(\omega, \mathbf{k}) \frac{k_i k_j}{k^2} + \varepsilon^T(\omega, \mathbf{k}) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right). \quad (2.9)$$

Продольная диэлектрическая проницаемость в классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ связана с динамическим структурным фактором соотношением (1.29).

Нелокальная динамическая проводимость также может быть представлена в виде продольной σ^L и поперечной σ^T частей, которые выражаются через диэлектрическую проницаемость

$$\sigma^{L/T}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega}{4\pi i} (\varepsilon^{L/T}(\omega, \mathbf{k}) - 1). \quad (2.10)$$

Метод расчета проводимости, основанный на теории линейного отклика, зависит от того, какая величина рассматривается в качестве возмущающего воз-

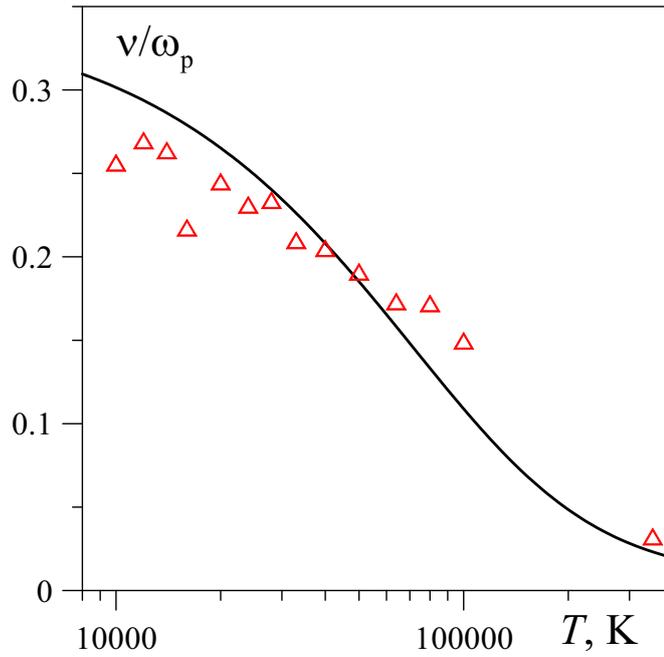


Рис. 2.3. Эффективная частота столкновений в зависимости от температуры при $\Gamma = 1$: точки — данные МД моделирования с потенциалом (1.18), линия — интерполяционная формула (2.5). Параметры плазмы указаны в таблице 2.2.

действия. Рассмотрим сначала случай, когда в качестве возмущения принимается внешнее электрическое поле, приложенное к системе зарядов. Без ограничения общности можно считать его направленным вдоль оси z . Для монохроматической волны запишем $\mathbf{E}^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}_z E_0^{\text{ext}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = \mathbf{e}_z E_0^{\text{ext}} e^{i(kz - \omega t)}$.

Соотношение между продольной компонентой плотности тока $\mathbf{j}_k = \mathbf{e}_z j_k^{\text{L}}$, являющейся откликом среды, и возмущающего поля $\mathbf{E}^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$, задается функций $\chi(\omega, k)$, которая связана с Фурье преобразованием АФТ для продольной компоненты плотности тока (см., например [281, 362])

$$\begin{aligned} \chi(\omega, k) &= -i\beta\Omega_0 \frac{k^2}{\omega} \langle j_k^{\text{L}}, j_k^{\text{L}} \rangle_{\omega+i\eta} \\ &= -i\beta\Omega_0 \frac{k^2}{\omega} \int_0^{\infty} \langle j_k^{\text{L}}(0), j_k^{\text{L}}(t) \rangle e^{i(\omega+i\eta)t} dt, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где Ω_0 — нормировочный объем (для МД ячейки $\Omega_0 = L^3$), скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают термодинамическое среднее, а величина η устремляется к нулю после выполнения термодинамического усреднения.

Флуктуационно-диссипационная теорема [28] связывает функцию отклика

$\chi(\omega, k)$ и диэлектрическую проницаемость

$$\varepsilon^L(\omega, k) = 1 - \frac{4\pi\chi(\omega, k)}{k^2 + 4\pi\chi(\omega, k)} = 1 - \frac{4\pi}{k^2}\Pi^L(\omega, k). \quad (2.12)$$

Напомним, что мнимая часть $\varepsilon^L(\omega, k)$ связана также с динамическим структурным фактором по формуле (1.29)).

Функция поляризации $\Pi^L(\omega, k)$ в (2.12) связывает плотность тока и *внутреннее* электрическое поле в среде, так же, как и упомянутая выше продольная динамическая проводимость

$$\sigma^L(\omega, k) = \frac{i\omega}{k^2}\Pi^L(\omega, k) = \frac{\beta\Omega_0 \langle j_k^L, j_k^L \rangle_{\omega+i\eta}}{1 + 4\pi i\beta\Omega_0 \langle j_k^L, j_k^L \rangle_{\omega+i\eta}/\omega}, \quad (2.13)$$

которая в [398] называется “внутренней” проводимостью. В свою очередь поперечная или “внешняя” проводимость связывает плотность тока с *внешним* электрическим полем

$$\sigma^T(\omega, k) = \frac{i\omega}{k^2}\chi(\omega, k) = \beta\Omega_0 \langle j_k^T, j_k^T \rangle_{\omega+i\eta}. \quad (2.14)$$

Величину $\sigma^{L/T}(\omega, k)$ можно также выразить через зависящую от частоты эффективную частоту столкновений $\nu^{L/T}(\omega, k)$, используя обобщенную формулу Друде [281]

$$\sigma^{L/T}(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{1}{\nu^{L/T}(\omega, k) - i\omega}. \quad (2.15)$$

При этом термин “частота столкновений” утрачивает свой изначальный смысл, однако функция $\nu^{L/T}(\omega, k)$ оказывается удобной для оценки скорости релаксационных процессов на микроскопическом уровне. Исходная модель Друде (1.6) получается заменой функции $\nu^{L/T}(\omega, k)$ на действительную константу $\nu = 1/\tau$, где τ — характерное время релаксации импульса. Как показано в [95] зависимость ν от частоты становится все более выраженной при увеличении неидеальности плазмы (для идеальной плазмы эта зависимость отсутствует).

Из формул (2.13) – (2.15) нетрудно получить выражения для $\nu^{L/T}(\omega, k)$ через

автокорреляторы тока

$$\frac{\nu^L(\omega, k)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{4\pi\beta\Omega_0 \langle j_k^L; j_k^L \rangle_{\omega+i\eta}} + i \left(\frac{\omega}{\omega_p} - \frac{\omega_p}{\omega} \right), \quad (2.16)$$

$$\frac{\nu^T(\omega, k)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{4\pi\beta\Omega_0 \langle j_k^T; j_k^T \rangle_{\omega+i\eta}} + i \frac{\omega}{\omega_p}. \quad (2.17)$$

В длинноволновом пределе продольная и поперечная проводимость совпадают, такое же соотношение имеет место для эффективной частоты столкновений

$$\sigma(\omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma^L(\omega, k) = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma^T(\omega, k), \quad (2.18)$$

$$\nu(\omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \nu^L(\omega, k) = \lim_{k \rightarrow 0} \nu^T(\omega, k). \quad (2.19)$$

Это приближение применимо, если длина волны внешнего электромагнитного излучения превышает радиус экранирования в плазме. Предел $\omega \rightarrow 0$ соответствует рассмотренной ранее статической проводимости.

Теоретические модели расчета динамической проводимости, основанные на учете сильных столкновений, нелокальных эффектов и динамического экранирования, описаны в [281–286, 488, 535, 536]. В [537] приводится также выражение для динамической проводимости, полученное из модели для кулоновского логарифма (2.4) и более общего выражения для $\sigma(\omega)$ через функцию распределения электронов по скоростям $f_e(v)$:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{3k_B T_e} \int \frac{v^2 f_e(v) d^3v}{\nu(v) - i\omega}, \quad \nu(v) = \frac{4\pi}{\gamma_E} r_L^2 n_i v \Lambda, \quad (2.20)$$

где множитель $\gamma_E \approx 0.58$ учитывает электрон-электронное взаимодействие в приближении Спинцера-Хэрма. Определение динамической проводимости из результатов МД моделирования с учетом различного типа граничных условий обсуждается в последующих двух подразделах.

2.3. Расчет динамической проводимости в периодической системе с учетом среднего поля

2.3.1. Описание метода моделирования

Как было показано в разделе 2.1 метод МД оказывается достаточно эффективным для расчета статической проводимости неидеальной плазмы, и его результаты хорошо согласуются с имеющимися теоретическими моделями и экспериментальными данными. Принципиальная проблема расчета динамической проводимости заключается в невозможности выполнить предельный переход $k \rightarrow 0$ для МД ячейки конечного объема. Такая же проблема возникает и при определении динамического структурного фактора [95, 312, 361, 362, 379, 382, 385, 388], где длинноволновый предел, как правило, определяется путем экстраполяции данных, полученных при $k > 0$.

Однако, как будет показано ниже, расчет проводимости $\sigma(\omega)$ и эффективной частоты столкновений $\nu(\omega)$ может быть выполнен в методе МД с хорошей точностью для ячейки конечного объема. Для доказательства этого факта мы рассмотрим для варианта метода, дающих значения продольной и поперечной частоты столкновений $\nu^L(\omega)$ и $\nu^T(\omega)$. Совпадение этих значения во всем исследованном диапазоне ω согласно (2.19) будет являться подтверждением соответствия их длинноволновому пределу.

Предположим, что ячейка МД моделирования с длиной ребра L является частью большой, но конечной системы зарядов. В этом случае смещение всех электронов в ячейке относительно ионов вдоль оси z должно привести к появлению нескомпенсированного заряда и возвращающей силы (рисунок 2.4а). Однако, при использовании периодических граничных условий этого не происходит, так как заряд, прошедший через границу ячейки, фактически появляется с другой стороны и средняя плотность заряда внутри ячейки при этом не изменяется (рисунок 2.4б).

Для учета появления нескомпенсированного заряда на предполагаемой отдаленной границе плазмы при сохранении периодических условий для движения зарядов внутри МД ячейки добавим в уравнения движения (1.25) дополнительную

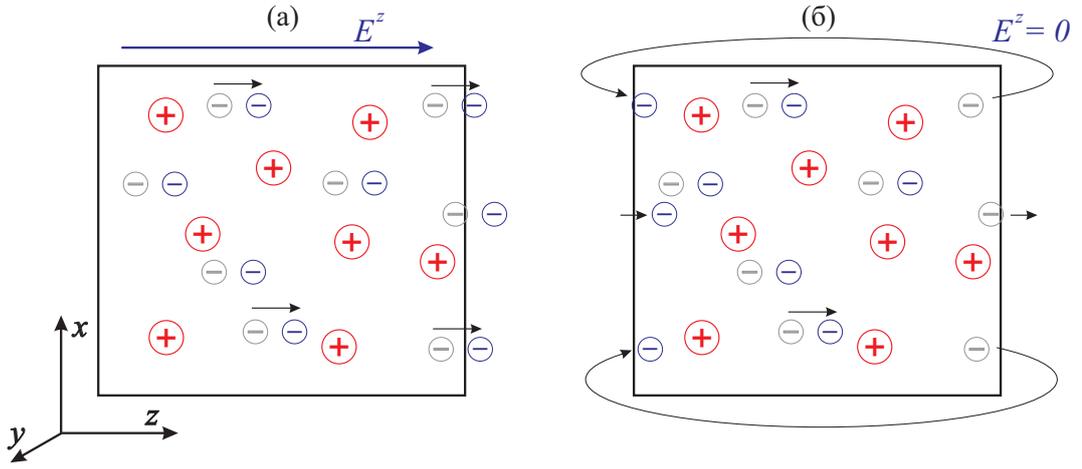


Рис. 2.4. Сдвиг электронов относительно ионов в МД ячейке с открытыми границами (а) и периодическими граничными условиями (б).

силу, действующую на все частицы со стороны среднего поля E^z :

$$m_c \frac{d^2 \mathbf{r}_{c,\alpha}}{dt^2} = \mathbf{F}_{c,\alpha}^{\text{short}} - q_c E^z(t) \mathbf{e}_z, \quad (2.21)$$

где c и α — тип и номер частицы, q_c — заряд частицы, $\mathbf{F}_{c,\alpha}^{\text{short}}$ — сумма сил со стороны других частиц в ячейке, найденная по методу ближайшего образа. Как было указано выше, размер ячейки L должен превышать эффективный радиус экранирования r_{scr} , поэтому первый член в правой части (2.21) определяет суммарную силу со стороны зарядов внутри сферы экранирования, а второй — силу со стороны среднего поля, создаваемого зарядами вне сферы экранирования.

Предполагая размер ячейки малым по сравнению с расстоянием до виртуальной границы плазмы, величину E^z можно представить в виде поля двух заряженных плоскостей. В этом случае оно может быть определено из следующего уравнения, которое решается одновременно с уравнениями движения частиц (2.21):

$$\frac{dE^z(t)}{dt} = -4\pi j^z(t), \quad (2.22)$$

где

$$j^z(t) = \frac{1}{L^3} \sum_c \sum_{\alpha=1}^{N_c} q_c v_{c,\alpha}^z(t). \quad (2.23)$$

— средняя плотность тока через произвольную плоскость перпендикулярную оси z . Интегрирование уравнения (2.22) с учетом начального условия $E^z(0) = 0$

дает

$$E^z(t) = \frac{4\pi}{L^3} \sum_c \sum_{\alpha=1}^{N_c} q_c r_{c,\alpha}^z(t). \quad (2.24)$$

Сохранение полной энергии \mathcal{E}_{tot} в данном случае обеспечивается добавлением к сумме потенциальной \mathcal{E}_{pot} и кинетической энергии части \mathcal{E}_{kin} дополнительной энергии, связанной с наличием среднего поля

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{tot}} &= \mathcal{E}_{\text{pot}} + \mathcal{E}_{\text{kin}} + \mathcal{E}_{\text{field}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{c,d} \sum_{\alpha,\beta}^{N_c, N_d} V_{cd}(\mathbf{r}_{\alpha,c} - \mathbf{r}_{\beta,d}) + \sum_c \frac{m_c}{2} \sum_{\alpha}^{N_c} \mathbf{v}_{\alpha,c}^2 + L^3 \frac{\mathbf{E}^2}{8\pi}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

На рисунке 2.5 показаны флуктуации $\mathcal{E}_{\text{tot}}(t)$ (кривая 1) и $\mathcal{E}_{\text{tot}}(t) - \mathcal{E}_{\text{field}}(t)$ (кривая 2) для фрагмента равновесной МД траектории. Из рисунка видно, что энергия поля составляет небольшую величину относительно полной энергии системы. То же относится и к силе (2.21), действующей на частицы, вклад в которую со стороны среднего поля является малым по сравнению с межчастичным взаимодействием внутри сферы экранирования. Флуктуации $\mathcal{E}_{\text{tot}}(t)$ являются следствием ошибок разностной схемы при интегрировании уравнений движения и стремятся к нулю при уменьшении шага по времени.

Для иллюстрации приведенной схемы рассмотрим колебания электронов вблизи положения локального равновесия при фиксированных ионах. В этом случае производная средней плотности тока по времени согласно (2.21) может быть выражена как

$$\frac{d\mathbf{j}(t)}{dt} = -\frac{e}{L^3} \sum_{\alpha=1}^{N_e} \frac{d\mathbf{v}_{\alpha}}{dt} = \frac{eN_e}{m_e L^3} (eE^z(t)\mathbf{e}_z - \mathbf{F}_{\text{int}}), \quad (2.26)$$

где

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \frac{1}{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_e} \mathbf{F}_{e,\alpha}^{\text{short}} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_e} \sum_{\beta=1}^{N_i} \mathbf{F}_{ei}(\mathbf{r}_{i,\beta}^{\text{NN}} - \mathbf{r}_{e,\alpha}), \quad (2.27)$$

а $\mathbf{r}_{i,\beta}^{\text{NN}}$ обозначает положения ионов с учетом метода ближайшего образа. Сила \mathbf{F}_{int} содержит только электрон-ионное взаимодействие, так как сумма по всем силам

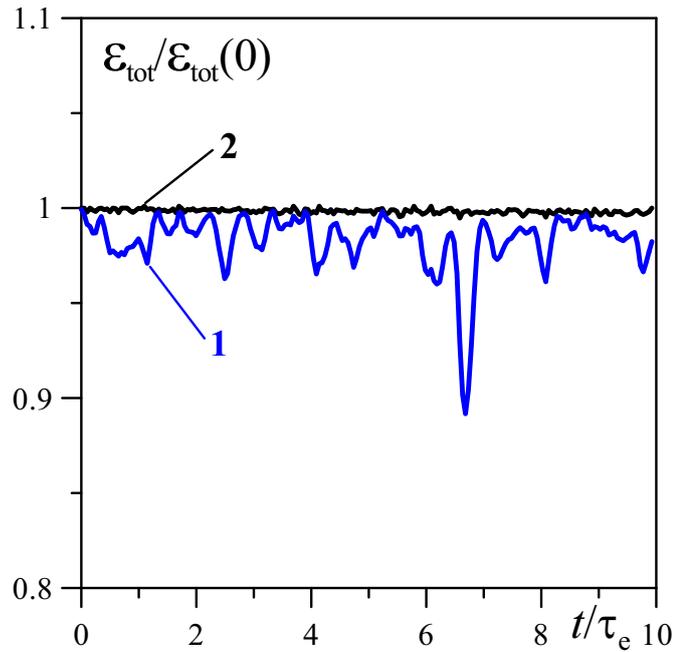


Рис. 2.5. Зависимость полной энергии МД системы от времени: 1 — без учета энергии среднего поля; 2 — с учетом энергии среднего поля; $\tau_e = 2\pi/\omega_p$ — период ленгмюровских плазменных колебаний.

между электронами равна нулю. Несмотря на то, что для каждого электрона в отдельности сила $F_{e,\alpha}^{\text{short}}$ превышает вклад среднего поля $eE^z(t)e_z$, при усреднении по всем электронам их амплитуды оказываются сравнимыми между собой.

Находя вторую производную E^z по времени из (2.22) и подставляя первую производную j из (2.26), получим

$$\frac{d^2 E^z}{dt^2} + \omega_p^2 E^z = \frac{\omega_p^2}{e} \langle F_{\text{int}}^z \rangle. \quad (2.28)$$

При усреднении по ансамблю величина $\langle F_{\text{int}}^z \rangle$ стремится к нулю, поэтому уравнение (2.28), как и предполагалось, описывает плазменные колебания с частотой ω_p .

2.3.2. Автокорреляционные функции тока

В рассмотренном методе модифицированной МД флуктуации плотности тока вдоль оси z и осей x , y различаются. Используя термины из предыдущего раздела, следует назвать компоненту $j^z(t) = j^L(t)$ продольной плотностью тока, а $j^{x/y}(t) = j^T(t)$ — поперечной. Каждая из них может быть использована для расчета соответствующей автокорреляционной функции и проводимости. Фактически при моделировании, как правило, производится усреднение по различным

направлениям оси z .

Рассмотрим безразмерные автокорреляционные функции для продольной и поперечной компонент плотности тока:

$$K_{jj}^{L/T}(t) = \frac{\langle j^{L/T}(t)j^{L/T}(0) \rangle}{\langle (j^{L/T})^2 \rangle} = \frac{4\pi\beta L^3}{\omega_p^2} \langle j^{L/T}(t)j^{L/T}(0) \rangle. \quad (2.29)$$

Здесь использовано выражение (2.8) для среднего тока $\langle (j^{L/T})^2 \rangle$. На рисунке 2.6 показан пример расчета данных автокорреляторов. Расчет проводился с псевдопотенциалом Кельбга (1.18). Для усреднения использовалась МД траектория длительностью $2.5 \cdot 10^4 \tau_e$ с общим числом начальных состояний системы для расчета автокоррелятора $5 \cdot 10^5$. Как видно из рисунка, исходный поперечный автокоррелятор $K_{jj}^T(t)$ является монотонно спадающей функцией, что полностью согласуется с предыдущими результатами [95].

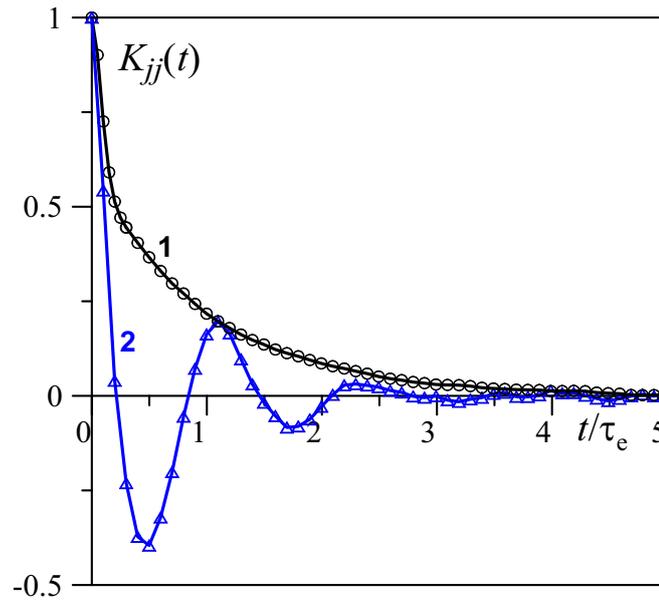


Рис. 2.6. Нормированная АФТ: 1 — $K_{jj}^T(t)$ для поперечной компоненты тока (без учета среднего поля), 2 — $K_{jj}^L(t)$ для продольной компоненты тока (с учетом среднего поля). Параметры плазмы: $T = 3.3 \cdot 10^4$ К, $n_e = 3.85 \cdot 10^{21}$ см $^{-3}$, $\Gamma = 1.28$, $m_i/m_e = 100$.

Добавление среднего поля в уравнения движения частиц, как было показано выше, приводит к возникновению возвращающей силы и колебаний среднего тока, проявляющихся в виде осцилляционного характера затухания $K_{jj}^L(t)$ при той же скорости уменьшения амплитуды, что и для $K_{jj}^T(t)$. Частота этих колебаний стремится к ω_p при $\Gamma \rightarrow 0$. Следует отметить, что вид представленных АФТ не

зависит от размера расчетной ячейки, если число частиц N выбрано достаточным для выполнения $r_{scr} < L/2$.

Для проверки влияния граничных условий было также проведено сравнение расчетов по методу ближайшего образа и схеме Эвальда, в которой учитываются не только ближайшие, но и более отдаленные образы частиц в квазипериодической системе (рисунок 2.7, полулогарифмический масштаб). Обсуждение применимости схемы Эвальда приведено в разделе 1.3.1. Потенциал Дойча был выбран для сопоставления с работами [312, 379]. Результаты показывают, что при выбранных параметрах плазмы и числе частиц $N_e = N_i = 200$ зависимость результатов от способа учета дальних образов частиц в пределах статистической погрешности отсутствует, т.е. в данном случае применение схемы Эвальда является избыточным. Аналогичные расчеты для динамической частоты столкновений, которая обсуждается ниже, показаны на рисунке 2.11.

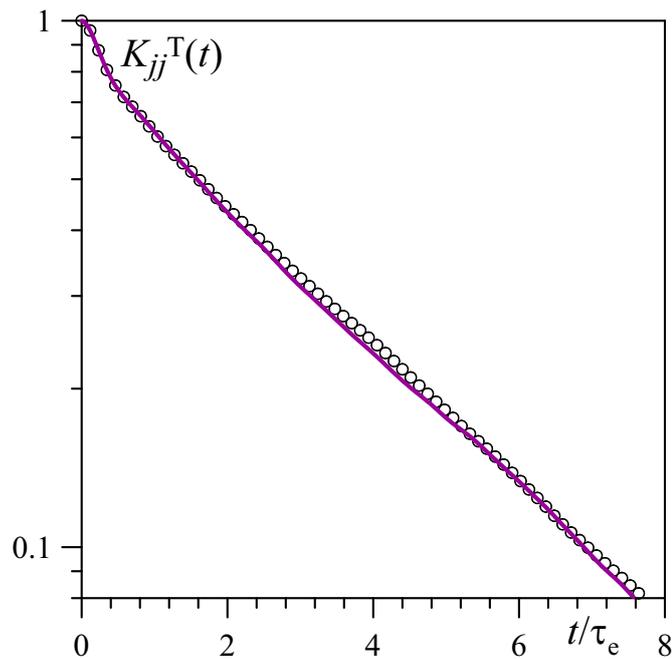


Рис. 2.7. АФТ для поперечной компоненты тока при моделировании с использованием метода ближайшего образа (точки) и схемы Эвальда (линия). Параметры плазмы: $T = 3.16 \cdot 10^5$ К, $\Gamma = 1.28$, $m_i/m_e = 100$, потенциал Дойча (1.14).

2.3.3. Эффективная частота столкновений в области низких частот

Перейдем теперь к определению динамической проводимости и эффективной частоты столкновений с использованием обоих способов учета среднего поля.

На рисунке 2.8 показаны нормированные действительная и мнимая части Фурье-преобразования АФТ

$$K_{jj}(\omega) = \omega_p \int_0^{\infty} e^{i\omega t} K_{jj}(t) dt = \frac{4\pi\beta L^3}{\omega_p} \lim_{k \rightarrow 0} \langle j_k, j_k \rangle_{\omega} = \frac{4\pi}{\omega_p} \sigma(\omega), \quad (2.30)$$

полученные при моделировании с учетом и без учета среднего поля (см. рисунок 2.6). Как и ожидалось, спектры отличаются наличием пика вблизи плазменной частоты для $K_{jj}^L(\omega)$.

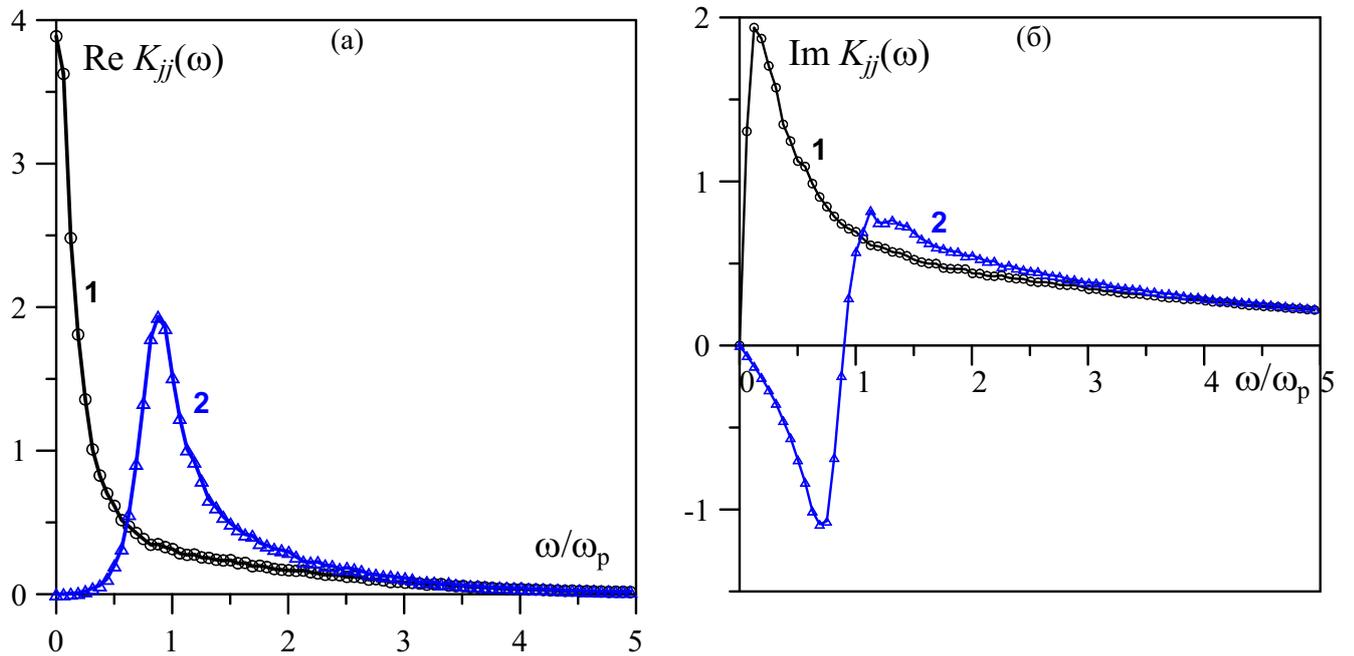


Рис. 2.8. Действительная (а) и мнимая (б) части Фурье-преобразования АФТ: 1 — для поперечной компоненты тока $K_{jj}^T(\omega)$ (без учета среднего поля); 2 — для продольной компоненты тока $K_{jj}^L(\omega)$ (с учетом среднего поля). Параметры плазмы указаны на рисунке 2.6.

Применяя теперь формулу (2.16) для преобразования $K_{jj}^L(\omega)$ в эффективную частоту столкновений $\nu^L(\omega)$ и формулу (2.17) для преобразования $K_{jj}^L(\omega)$ в $\nu^T(\omega)$ получим результат, представленный на рисунке 2.9. Из рисунка видно, что $\nu^L(\omega)$ и $\nu^T(\omega)$ совпадают во всем диапазоне частот. Это подтверждает правильность выделения $j^z(t)$ в качестве продольной компоненты тока и $j^{x/y}(t)$ — в качестве поперечной, а также обосновывает то, что данный метод расчета соответствует длинноволновому пределу. Для контроля точности Фурье преобразования на рисунке 2.9б показан также расчет мнимой части, выполненный из действительной

части по формуле Крамерса-Кронига. Динамическая проводимость может быть получена из полученных значений $\nu(\omega) = \nu^L(\omega) = \nu^T(\omega)$ по формуле (2.15).

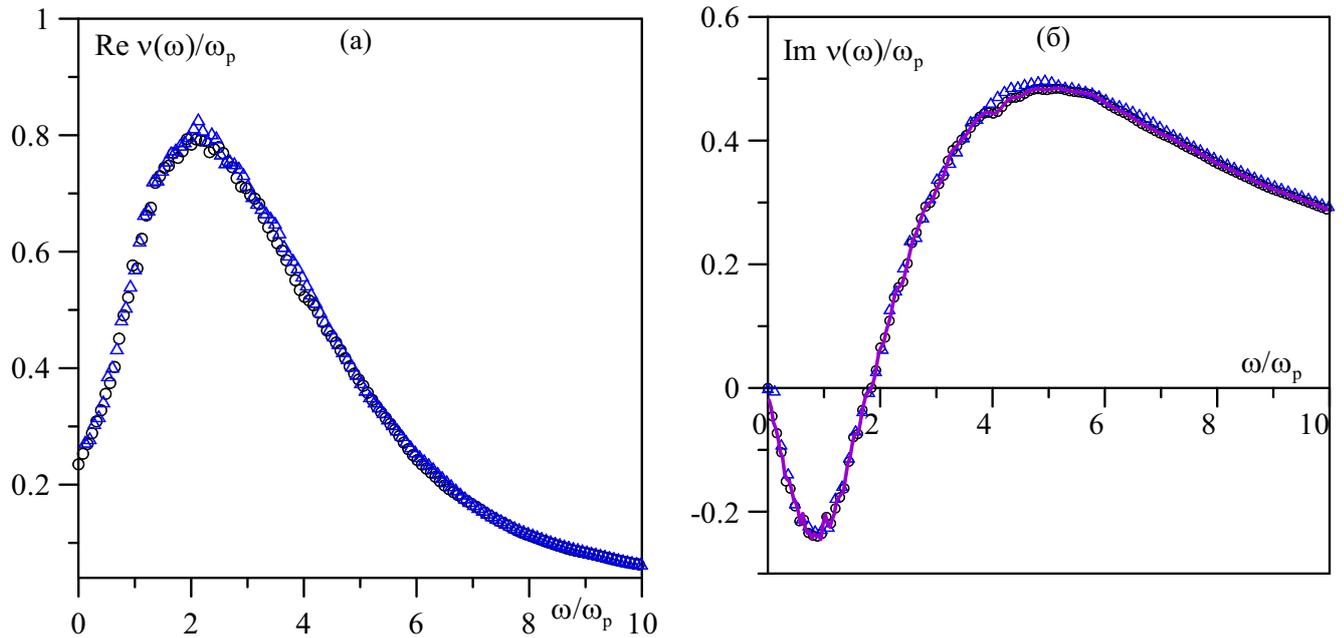


Рис. 2.9. Действительная (а) и мнимая (б) части эффективной частоты столкновений: кружки — для поперечной компоненты тока $\nu^T(\omega)$ (без учета среднего поля); треугольники — для продольной компоненты тока $\nu^L(\omega)$ (с учетом среднего поля). Линия на рисунке (б) — пересчет мнимой части из действительной по формуле Крамерса-Кронига. Параметры плазмы указаны на рисунке 2.6.

Зависимость эффективной частоты столкновений от температуры плазмы при фиксированном параметре неидеальности представлена на рисунке 2.10. Рисунок показывает, что уменьшение температуры приводит к росту абсолютного значения $\nu(\omega)/\omega_p$ во всем диапазоне частот, что объясняется углублением потенциала электрон-ионного взаимодействия (рисунок 2.2а). При этом в статическом пределе $\omega = 0$ частота столкновений для выбранного диапазона температур меняется незначительно (см. также рисунок 2.3), в то время как зависимость ν от частоты претерпевает существенные изменения: при меньших температурах $\text{Re } \nu(\omega)/\omega_p$ имеет более выраженный максимум, сдвинутый в область больших частот. Следует учесть, что плазменная частота ω_p , на которую нормируется $\nu(\omega)$, уменьшается с ростом температуры при постоянном параметре неидеальности, поэтому для ненормированного значения $\nu(\omega)$ указанный эффект проявляется в меньшей степени.

Как и для исходной АФТ, мы провели сравнение эффективной частоты столкновений, полученной с применением и без применения схемы Эвальда. Результат

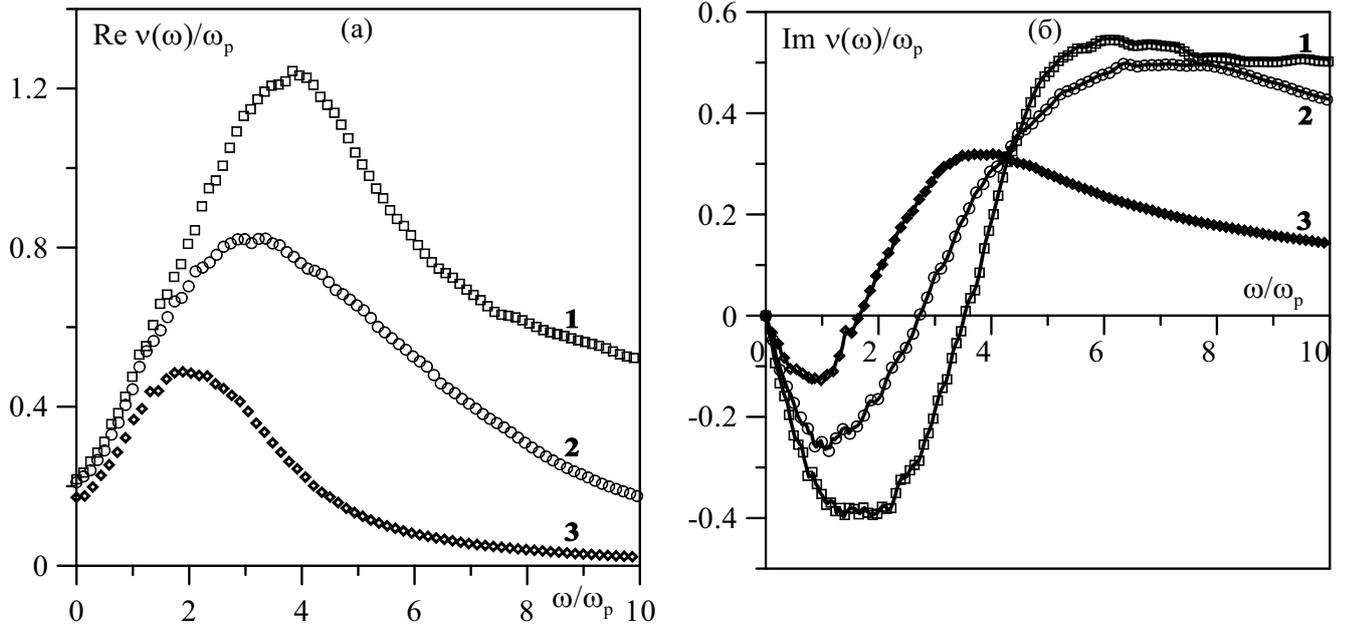


Рис. 2.10. Действительная (а) и мнимая (б) части эффективной частоты столкновений в зависимости от температуры плазмы: 1 — $1.6 \cdot 10^4$ К, 2 — $3.3 \cdot 10^4$ К, 3 — $8 \cdot 10^4$ К.

показан на рисунке 2.11, где видно отсутствие эффекта от применения схемы Эвальда при выбранных параметрах плазмы в пределах статистических ошибок.

На рисунке 2.12 показано сравнение данных моделирования для $\nu(\omega)$ с различными теоретическими моделями. Предварительная версия этого рисунка была опубликована в [95], однако текущие данные имеют существенно меньшую статистическую погрешность. Несмотря на некоторые количественные отличия, мы видим, что общая форма зависимости $\nu(\omega)$ для результатов МД моделирования и теоретических моделей довольно близка.

2.3.4. Эффективная частота столкновений в области высоких частот

Высокочастотная часть эффективной частоты столкновений $\omega \gg \omega_p$ определяется в основном от близкодействующей частью потенциала электрон-ионного взаимодействия и наличием глубоколежащих связанных состояний. Для ее расчета вместо АФТ удобно использовать автокоррелятор производной тока про времени (или автокоррелятор силы). Рассмотрим преобразование

$$\langle \mathbf{j}; \mathbf{j} \rangle_\omega = \frac{i}{\omega} \left(\langle \mathbf{j}^2 \rangle - \left\langle \mathbf{j}; \frac{d\mathbf{j}}{dt} \right\rangle_\omega \right) = \frac{i}{\omega} \left(\langle \mathbf{j}^2 \rangle - \frac{i}{\omega} \left\langle \frac{d\mathbf{j}}{dt}; \frac{d\mathbf{j}}{dt} \right\rangle_\omega \right), \quad (2.31)$$

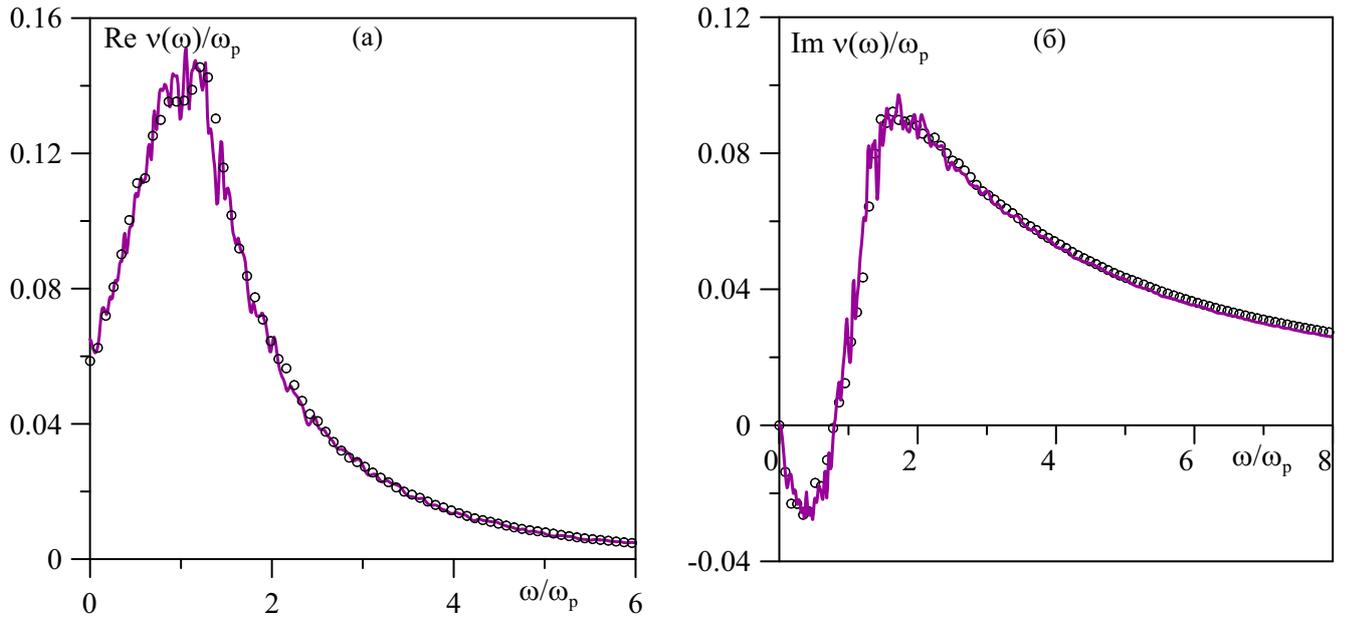


Рис. 2.11. Действительная (а) и мнимая (б) части эффективной частоты столкновений при моделировании с использованием метода ближайшего образа (точки) и схемы Эвальда (линии). Параметры плазмы указаны на рисунке 2.7.

где производная плотности тока по времени согласно (2.26) может быть выражена через полную силу всех ионов на все электроны и силу со стороны среднего поля.

Вследствие численных ошибок члены, пропорциональные ω в (2.16) – (2.17), могут приводить к расходимости $\text{Im } \nu(\omega) \sim \omega$ на больших частотах. Покажем, что выражение $\nu(\omega)$ через автокоррелятор силы лишено этого недостатка. Поскольку при $\omega \rightarrow \infty$ членом ω_p/ω в формуле (2.16) можно пренебречь, то для простоты будем считать $\nu^L(\omega) \approx \nu^T(\omega)$. Используя (2.31), запишем

$$\frac{\nu^{L/T}(\omega)}{\omega_p} = \frac{i \frac{\omega}{\omega_p} \left\langle \frac{d\mathbf{j}}{dt}, \frac{d\mathbf{j}}{dt} \right\rangle_{\omega}}{i \frac{\omega \omega_p^2}{4\pi L^3 \beta} + \left\langle \frac{d\mathbf{j}}{dt}, \frac{d\mathbf{j}}{dt} \right\rangle_{\omega}}. \quad (2.32)$$

Опыт расчетов показывает, что при $\omega \leq \omega_p$ более целесообразно использовать автокоррелятор тока и выражения (2.16) – (2.17), а при $\omega > \omega_p$ — автокоррелятор силы и выражение (2.32). Результаты расчета высокочастотной части $\nu(\omega)$ в зависимости от температуры при фиксированной степени неидеальности плазмы показаны на рисунке 2.13 в двойном логарифмическом масштабе.

Из рисунка видно, что асимптотическим поведением действительной части $\nu(\omega)$ при $\omega \gg \omega_p$ во всех случаях является $\text{Re } \nu(\omega) \sim \omega^{-\alpha_r}$. Величина α_r , получен-

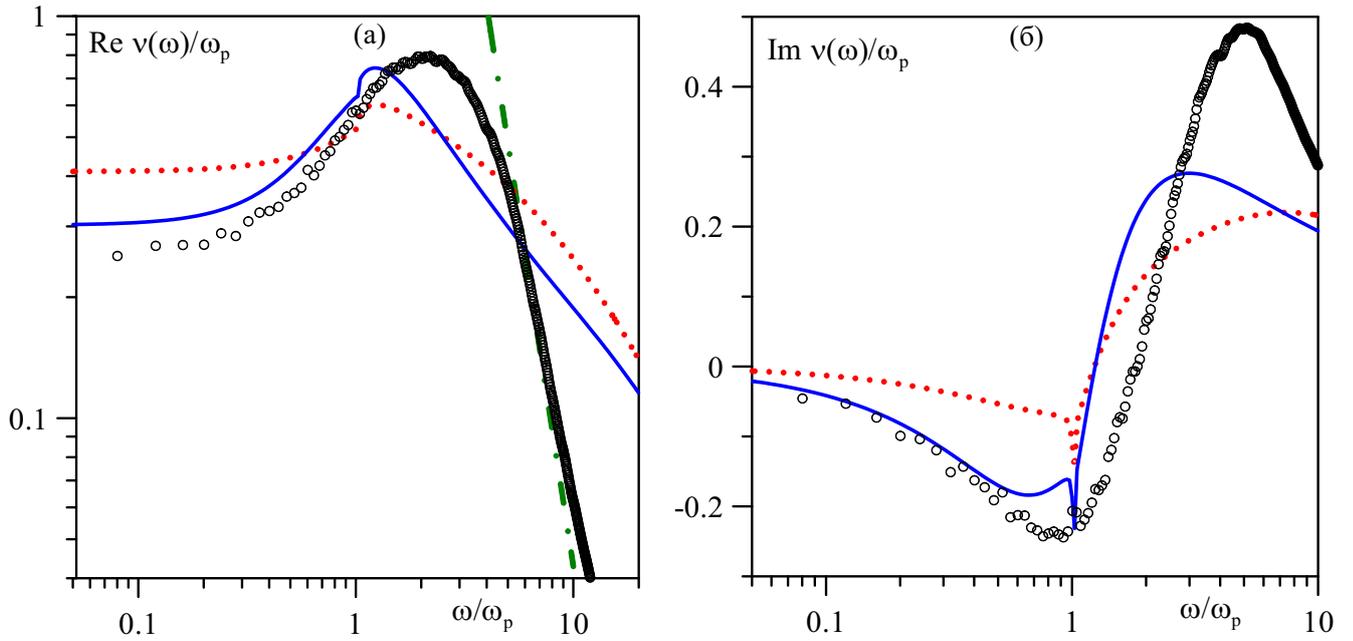


Рис. 2.12. Действительная (а) и мнимая (б) части эффективной частоты столкновений в сравнении с квантово-статистическими моделями: кружки — результаты МД, пунктир — расчет с учетом сильных столкновений и динамического экранирования [282], сплошная кривая — то же с учетом коэффициентом ренормализации для $\nu(\omega)$, штрих-пунктирная линия — асимптотика на больших частотах для потенциала Кельбга. Параметры плазмы указаны на рисунке 2.6.

ная путем аппроксимации данных МД моделирования, представлена в таблице 2.2. В среднем результат аппроксимации близок к $\alpha_r \approx 3.5$, что совпадает с аналитической асимптотикой для потенциала Кельбга [282], но отличается от асимптотики для кулоновского потенциала $\alpha_r = 1.5$ [281]. Высокочастотная асимптотика для мнимой части $\text{Im } \nu(\omega) \sim \omega^{-\alpha_i}$, согласно результатам из таблицы 2.2, совпадает с аналитическим результатом $\alpha_r = 1$, который в данном случае не зависит от формы межчастичного потенциала.

Проведенные расчеты демонстрируют влияние короткодействующей части межчастичного потенциала взаимодействия на динамику частиц и могут использоваться, например, для оценки применимости псевдопотенциальных моделей при высоких частотах.

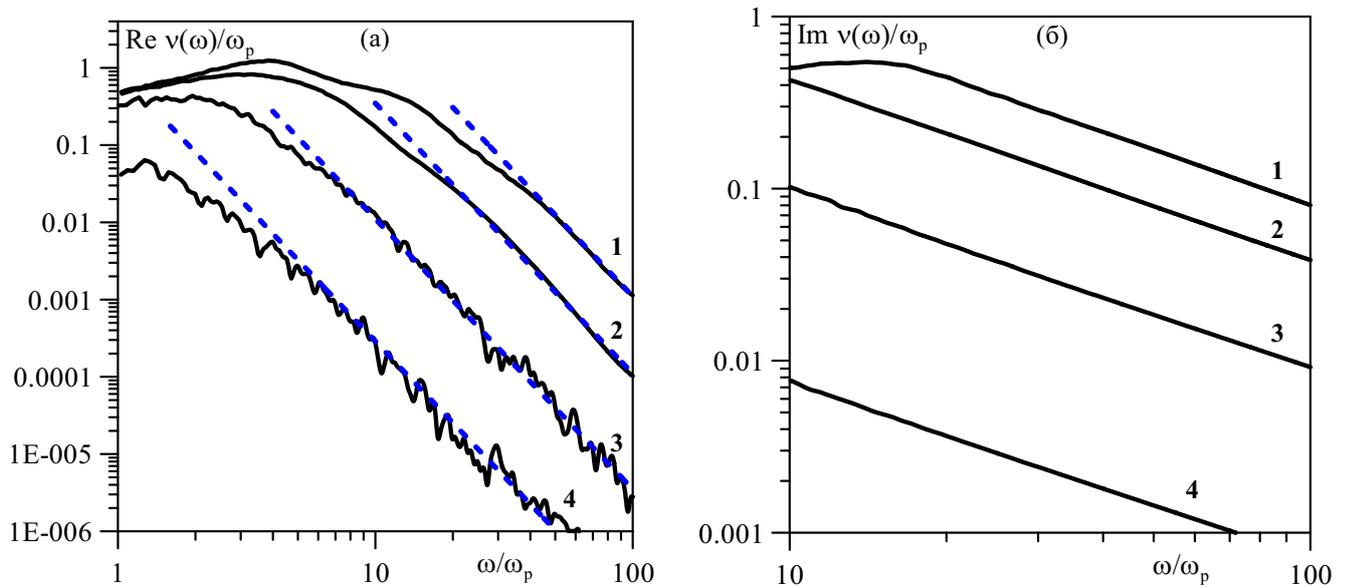


Рис. 2.13. Высоочастотная часть эффективной частоты столкновений в зависимости от температуры: 1 — $1.6 \cdot 10^4$ К, 2 — $3.3 \cdot 10^4$ К, 3 — 10^5 К, 4 — $3.5 \cdot 10^5$ К; (а) действительная часть, (б) мнимая часть. Линии — асимптотика $\nu \sim \omega^{-3.5}$. Параметры плазмы указаны в таблице 2.2.

2.4. Расчет динамической проводимости в системе с отражающими границами

2.4.1. Описание метода моделирования

Использование периодических граничных условий (ПГУ) стало фактически стандартом для моделирования пространственно-однородных систем, в том числе электрон-ионной плазмы. Несмотря критику этого типа граничных условий, например, в [447] с предложением использовать отражающие граничные условия (ОГУ) или “зеркальные стенки”, большинство работ по МД моделированию неидеальной плазмы используют именно ПГУ. Конкретная реализация может содержать либо наиболее простой метод ближайшего образа, либо схему Эвальда, хотя в предыдущем разделе было показано, что схема Эвальда не вносит существенного вклада в динамическую частоту столкновений при правильном выборе размера ячейки. Область применимости схемы Эвальда, по-видимому, относится в первую очередь к состояниям плазмы, близким к вигнеровской кристаллизации.

Вопрос выбора граничных условий становится не столь однозначным при переходе к методу молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП), который является расширением классической МД. Описанная в разделе 1.3.6 про-

блема расплывания волновых пакетов со временем связана именно с формальным отсутствием пространственной границы, в результате чего волновой пакет может неограниченно расширяться. В этом случае использование отражающих граничных условий может быть оправдано (более подробно этот вопрос обсуждается в главе 5). При этом, однако, необходимо исследовать влияние отражающих стенок на измеряемые параметры плазмы, в частности, на динамическую проводимость. В данном подразделе описывается такое исследование, выполненное на основе классической МД. Исходя из его результатов, сделаны выводы о возможности и ограничениях применимости ОГУ, которые используются далее при разработке метода МДВП.

Для сравнительного моделирования рассматриваются ПГУ с методом ближайшего образа и ОГУ, которые могут иметь несколько технических реализаций. При использовании полностью непроницаемых стенок, для частицы, пересекающей границу ячейки, производится замена компоненты скорости, перпендикулярной стенке, на противоположную, а ее соответствующая координата “отражается” от стенки за один шаг по времени (рисунок 2.14а). Эта схема обеспечивает точное сохранение средней плотности частиц в объеме, так как ни одна из них не может оказаться за стенкой. В то же время такой алгоритм имеет проблемы с сохранением полной энергии из-за численных ошибок, особенно при использовании разностной схемы “Leap-Frog” для интегрирования уравнений движения, и требует существенного уменьшения шага по времени, что, естественно, замедляет расчет.

Другим вариантом реализации ОГУ являются частично проницаемые стенки, когда при выходе частицы за границу по оси x на нее начинает действовать потенциал

$$V_{\text{wall}}(x) = \begin{cases} k(|x| - L/2)^2, & |x| > L/2, \\ 0, & |x| \leq L/2. \end{cases} \quad (2.33)$$

В этом случае отражение частицы от стенки происходит за несколько шагов (рисунок 2.14б). Управляя параметром k можно обеспечить, с одной стороны, сохранение полной энергии без существенного уменьшения шага интегрирования уравнений движения, а с другой стороны — удержание частиц в заданном объеме.

Если расширение системы из-за частичного выхода частиц за стенку замет-

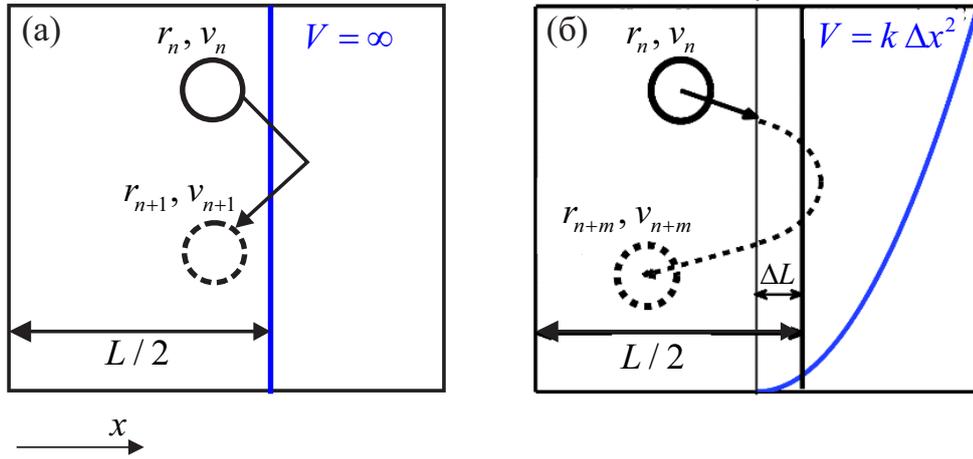


Рис. 2.14. Отражающие граничные условия: (а) полностью непроницаемая стенка, (б) отражающая стенка с использованием гармонического ограничивающего потенциала и сдвигом по оси x .

ным образом влияет на среднюю плотность, то потенциал (2.33) может сдвинут вдоль оси x к центру ячейки

$$V_{\text{wall}}(x) = \begin{cases} k(|x| - L'/2)^2, & |x| > L'/2, \\ 0, & |x| \leq L'/2. \end{cases} \quad (2.34)$$

где $L' = L - 2\Delta L$, $\Delta L = (3k_B T/2k)^{1/2}$ (см. рисунок 2.14б).

2.4.2. Влияние граничных условия на термодинамические параметры плазмы

Задача проведения расчетов заключалась в том, чтобы получить количественную оценку влияния граничных условий на характеристики плазмы при различных размерах МД ячейки. Для этого были выбраны три набора параметров равновесной плазмы, перечисленные в таблице 2.3. Исходя из результатов, представленных в подразделе 2.1, видно, что эти наборы параметров относятся к различным состояниям плазмы: 1 — малая степень неидеальности, 2 — неидеальная невырожденная плазма, 3 — неидеальная плазма с небольшой степенью вырождения электронов.

Поскольку данные результаты используются далее в главе 5 для обоснования применимости ОГУ в методе МДВП, в качестве потенциалов V_{ei} и V_{ee} в (1.28) был выбран псевдопотенциал (1.20), соответствующий взаимодействию двух гауссов-

Таблица 2.3. Параметры плазмы для сравнительного моделирования с различными типами граничных условий.

№	$T, 10^3 \text{ К}$	$n_e, 10^{21} \text{ см}^{-3}$	Γ	Θ
1	30	0.0242	0.26	84.7
2	30	2.89	1.28	3.49
3	30	24.2	2.6	0.85

ских волновых пакетов с постоянной шириной, а взаимодействие ионов описывалось кулоновским потенциалом

$$V_{ee}(r) = \frac{e^2}{r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\lambda_{ee}}\right), \quad V_{ei}(r) = \frac{Ze^2}{r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\lambda_{ei}}\right), \quad V_{ii}(r) = \frac{Z^2e^2}{r}, \quad (2.35)$$

где $\lambda_{ei} = \lambda_{ee} = 0.318 \text{ нм}$. Отражающие границы (2.34) применялись по всем направлениями, таким образом полная энергия взаимодействия частиц со стенками имела вид

$$U_{\text{ext}} = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} V_{\text{wall}}(r_{\alpha i}), \quad \alpha = x, y, z. \quad (2.36)$$

Коррекция положения отражающего потенциала (2.34) вносила вклад порядка 1 % в расчет средней потенциальной энергии.

Модельное отношение масс ионов и электронов составляло $m_i/m_e = 100$, типичное значение шага по времени Δt соответствовало данным таблицы 2.1. Расчеты для каждого из набора параметров плазмы из таблицы 2.3 проводились с различным числом ионов в диапазоне $N_i = 16 - 32000$ ($N = 2N_i$). Длина равновесных траекторий варьировалась от 10^5 шагов ($\sim 0.1 \text{ пс}$) для $N_i = 32000$ до $5 \cdot 10^6$ шагов ($\sim 10 \text{ пс}$) для $N_i = 16$ и определялась вычислительными возможностями оборудования. Для улучшения точности усреднение результатов проводилось по 3 – 6 независимым траекториям. С целью уменьшения времени расчета межчастичных взаимодействий использовались графические ускорители.

Средняя потенциальная энергия определялась путем усреднения вдоль траектории выражения (1.28), давление рассчитывалось на основе формулы для ви-

риала [348]

$$P = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{1}{3L^3} \left\langle \sum_{i<j}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}_{ij} \right\rangle, \quad (2.37)$$

где \mathbf{f}_{ij} — силы межчастичного взаимодействия.

Расчет основной части МД траектории без использования термостата позволяет избежать искажения функции распределения частиц по скоростям, но приводит к небольшому отличию фактической средней температуры вдоль траектории T_{fact} от заданной температуры T . В расчетах наблюдалось расхождение между T_{fact} и T до 5% при дрейфе полной энергии системы около 0.2%. Поскольку этот эффект оказывает влияние на рассчитываемые термодинамические величины, проводилась коррекция результатов для средней потенциальной энергии и давления, исходя из их зависимостей от температуры, определенных также на основе МД расчетов: $A(T) = A(T_{\text{fact}}) + \frac{dA}{dT}(T - T_{\text{fact}})$, где A — средняя потенциальная энергия на одну частицу U или давление P . Характерный вид зависимостей $U(T)$ и $P(T)$ представлен на рисунке 2.15.

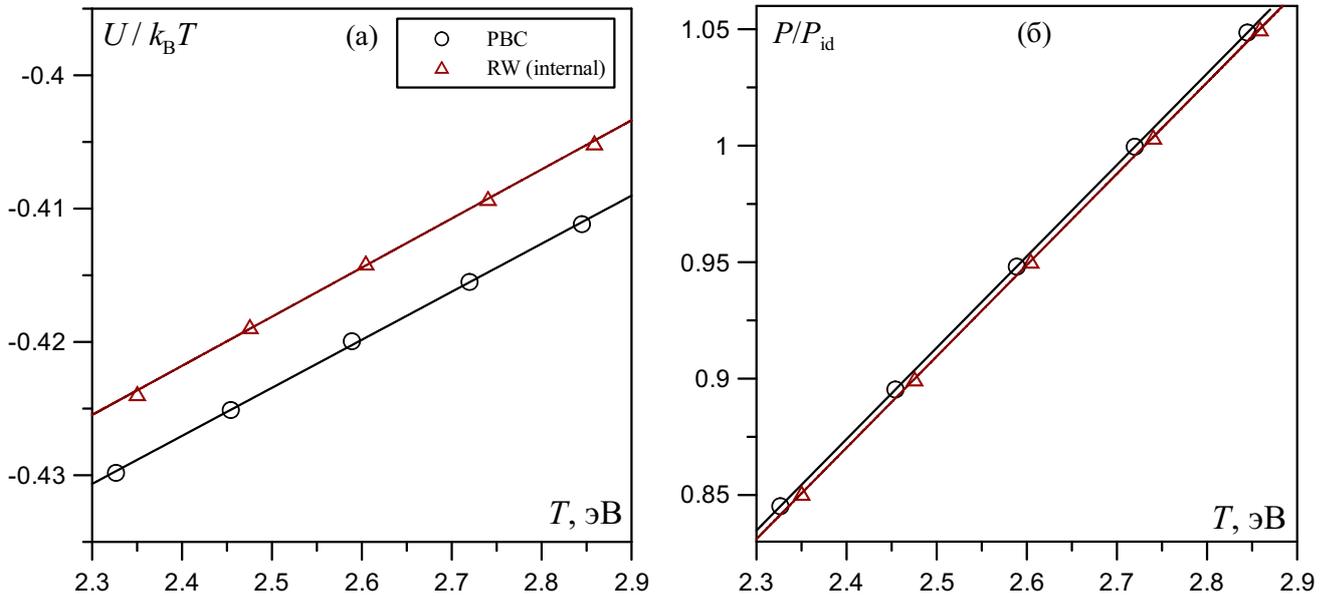


Рис. 2.15. Средняя потенциальная энергия на частицу (а) и давление (б) в зависимости от температуры для ПГУ (кружки) и ОГУ (треугольники). $P_{\text{id}} = nk_B T$ — давление идеального газа. Сплошные линии — линейная аппроксимация $U(T)$ и $P(T)$. Параметры расчета: $\Gamma = 1.28$, $N_i = 4096$.

Рассчитанный профиль потенциальной энергии вдоль произвольной оси x (рисунок 2.16) показывает наличие приповерхностного слоя плазмы, в котором свойства системы (в данном случае потенциальная энергия) отличаются от сред-

них по объему. Длина этого слоя по оси x примерно соответствует характерной длине экранирования r_{scr} . Как и следовало ожидать, этот слой занимает больший относительный объем для систем с меньшим числом частиц и с меньшей плотностью (меньшим значением Γ). В то же время при увеличении плотности растет разница между энергией в приповерхностном слое и в остальном объеме плазмы. Сплошной и пунктирной линиями на рисунке 2.16а показан сдвиг потенциала для коррекции эффективного объема системы.

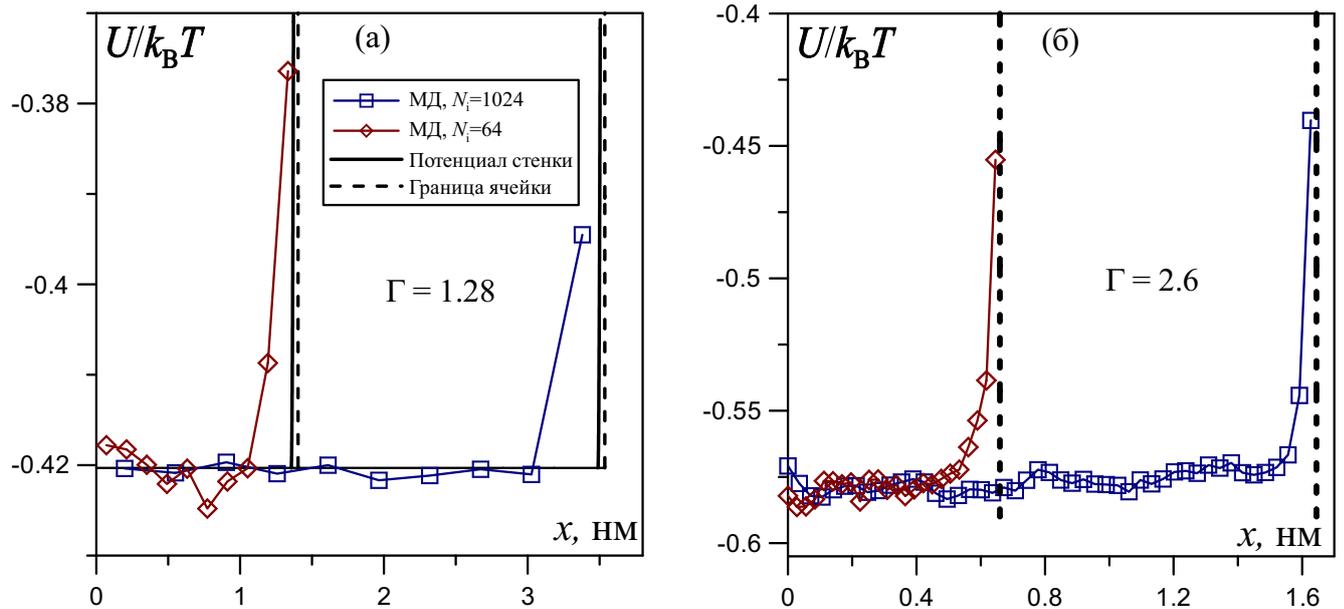


Рис. 2.16. Профиль потенциальной энергии вдоль оси x , полученный из МД моделирования с ОГУ при $\Gamma = 1.28$ (а) и $\Gamma = 2.6$ (б): точки — данные моделирования для $N_i = 64$ (ромбы) и $N_i = 1024$ (квадраты), сплошная линия — потенциал отражающей стенки (2.34), пунктир — граница ячейки $L/2$ при использовании ПГУ. Горизонтальная линия на рисунке (а) — предельное значение средней потенциальной энергии при $N_i \rightarrow \infty$ (см. рисунок 2.18а).

Пример зависимости указанных выше термодинамических параметров от крутизны потенциала стенки k (см. выражение (2.34)) показан на рисунке 2.17. Видно, что эта зависимость становится более слабой с ростом k за счет уменьшения ширины переходного слоя вблизи поверхности (рисунок 2.16), однако увеличение k приводит к большим численным ошибкам при решении уравнений движения. Анализ такого рода зависимостей позволил выбрать оптимальное значение $k = 267 \text{ Дж/м}^2$, достаточное для отражения частицы от границы за несколько шагов и в то же время не ухудшающее точность сохранения полной энергии.

Интересно отметить, что исключение из расчета энергии приповерхностного слоя, показанного на рисунке 2.16, существенно ослабляет зависимость от пара-

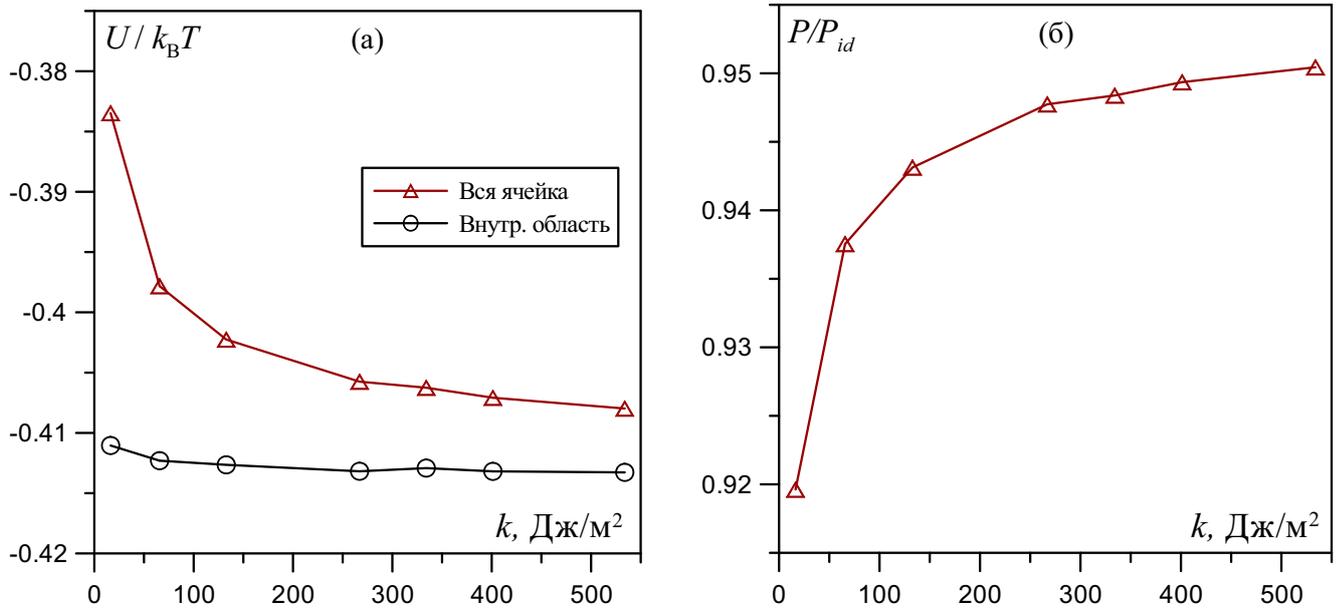


Рис. 2.17. Средняя потенциальная энергия на частицу (а) и давление (б) в зависимости от кривизны отражающего потенциала стенки при использовании ОГУ. На рисунке (а) показан результат усреднения энергии по всей ячейке (треугольники) и по внутренней области, исключая приповерхностный слой (кружки). Параметры расчета: $\Gamma = 1.28$, $N_i = 4096$.

метра k (см. кружки на рисунке 2.17а). Этот прием используется далее для более точного определения термодинамических величин в случае ОГУ.

Рассмотрим влияние различного типа граничных условий на сходимость рассчитанных термодинамических параметров с ростом числа частиц в МД ячейке. На рисунке 2.18 представлены расчеты для трех наборов параметров плазмы, указанных в таблице 2.3 (часть данных результатов опубликована в [538]). Как видно из рисунка, при использовании ПГУ энергия и давление быстрее сходятся к своим предельным значениям $U_{\text{bulk}} = \lim_{N_i \rightarrow \infty} U(N_i)$ и $P_{\text{bulk}} = \lim_{N_i \rightarrow \infty} P(N_i)$, чем при использовании ОГУ. Это и объясняет наибольшее распространение ПГУ для моделирования пространственно однородных систем.

Обращая внимание на отклонения $U - U_{\text{bulk}}$ и $P - P_{\text{bulk}}$ для ПГУ, можно видеть, что из-за малого радиуса экранирования r_{scr} , относительно небольшое число частиц в ячейке оказывается достаточным для того, чтобы рассчитанные значения термодинамических величин были близки к своим предельным значениям (результаты для $\Gamma = 2.6$ имеют худшую статистику). Например, при $\Gamma = 1.28$ и $N = 128$ относительное отклонение энергии $|U - U_{\text{bulk}}|/U_{\text{bulk}}$ составляет 2.7 % для $N_i = 16$ и 0.5 % для $N_i = 128$; относительное отклонение давления $|P - P_{\text{bulk}}|/P_{\text{bulk}}$: 1.0 %

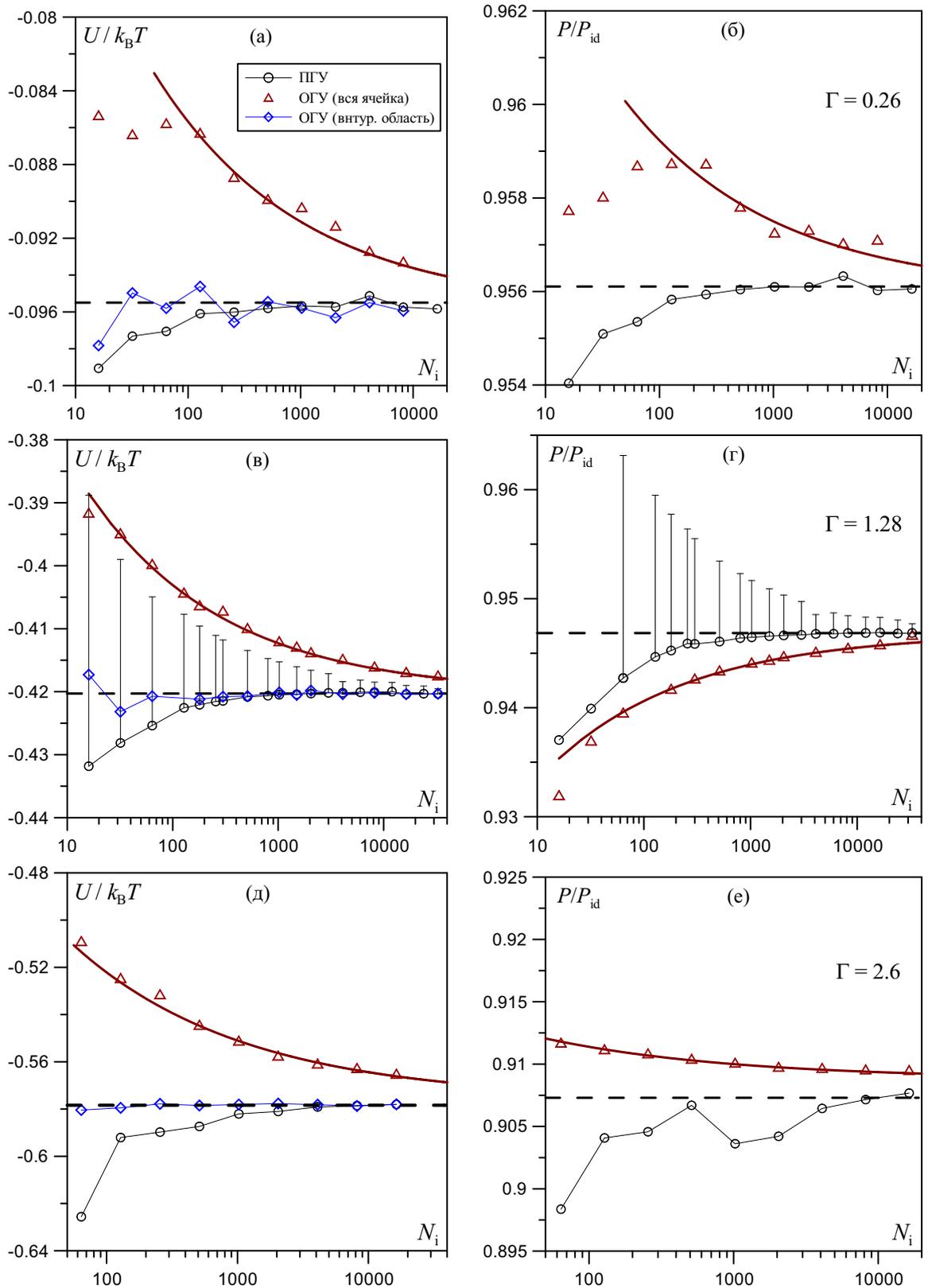


Рис. 2.18. Средняя потенциальная энергия на частицу (а), (в), (д) и давление (б), (г), (е) в зависимости от числа ионов при использовании ОГУ (кружки), ПГУ с усреднением по всей ячейке (треугольники), ПГУ с усреднением по внутренней области без приповерхностного слоя (ромбы). Пунктирные линии показывают асимптотику при $N_i \rightarrow \infty$, сплошные красные линии — аппроксимации отклонения энергии $U_{rw,fit}$ и давления $P_{rw,fit}$ (2.39). Вертикальные линии на рисунках (в) и (г) показывают средний уровень термодинамических флуктуаций соответствующих величин. Значения параметра неидеальности указаны на графиках.

для $N_i = 16$ и 0.2 % для $N_i = 128$. Этот результат, в частности, подтверждает правильность выбора числа частиц при обсуждавшихся ранее расчетах статической и динамической проводимости (см. таблицу 2.1), а также открывает возможность для применения более сложных методов моделирования, таких как МДВП, где выбор числа частиц имеет решающее значение.

Также следует отметить, что численные ошибки определения энергии и давления значительно ниже, чем средний уровень статистических флуктуаций указанных величин, определяемый как

$$\overline{(\delta U)^2} = \overline{(U - \bar{U})^2} \sim N_i^{-1/2}, \quad \overline{(\delta P)^2} = \overline{(P - \bar{P})^2} \sim N_i^{-1/2}. \quad (2.38)$$

На рисунках 2.18(в–г) этот уровень показан вертикальными линиями.

Обратимся теперь к результатам для ОГУ. Как видно из рисунка 2.18 в этом случае отклонения энергии и давления от своих предельных значений существенно выше. Поскольку размер приповерхностного слоя, вносящего искажения в измеряемые величины, определяется эффективным радиусом экранирования r_{scr} и не зависит от числа частиц в системе, то ошибка определения энергии и давления должна уменьшаться с ростом числа частиц как $N^{-1/3}$:

$$U_{rw,fit} - U_{bulk} = \zeta N^{-1/3}, \quad P_{rw,fit} - U_{bulk} = \eta N^{-1/3}, \quad (2.39)$$

где параметры ζ и η могут быть определены аппроксимацией МД данных. Указанные аппроксимации показаны на рисунке 2.18 с помощью сплошных красных линий. Видно, что они хорошо соответствуют данным моделирования при больших N_i .

Наиболее важный вывод, следующий из результатов, показанных на рисунке 2.18, состоит в том, что при исключении из расчета приповерхностного слоя плазмы, сходимость результатов с ростом числа частиц для ОГУ становится даже лучшей, чем для ПГУ. Таким образом, если искомую величину удастся определить во внутреннем объеме ячейки, то использование ОГУ не вносит дополнительной погрешности в результат моделирования. Этот вывод будет использован в дальнейшем при описании метода МДВП.

2.4.3. Расчет динамической проводимости

Перейдем теперь к результатам расчета Фурье-преобразования АФТ (2.30), связанного с динамической проводимостью плазмы, при использовании ОГУ и сравним их с обсуждавшимися в разделе 2.3 результатами для ПГУ (рисунок 2.19а). Их рисунка видно, что монотонный характер затухания $K_{jj}(\omega)$ для ПГУ, в случае ОГУ претерпевает существенные изменения. Характер этих изменений напоминает переход от поперечной $K_{jj}^T(\omega)$ к продольной $K_{jj}^L(\omega)$ компоненте тока (см. рисунок 2.8), который в разделе 2.3 был выполнен посредством добавления внешнего среднего поля, создаваемого зарядами на воображаемых удаленных поверхностях.

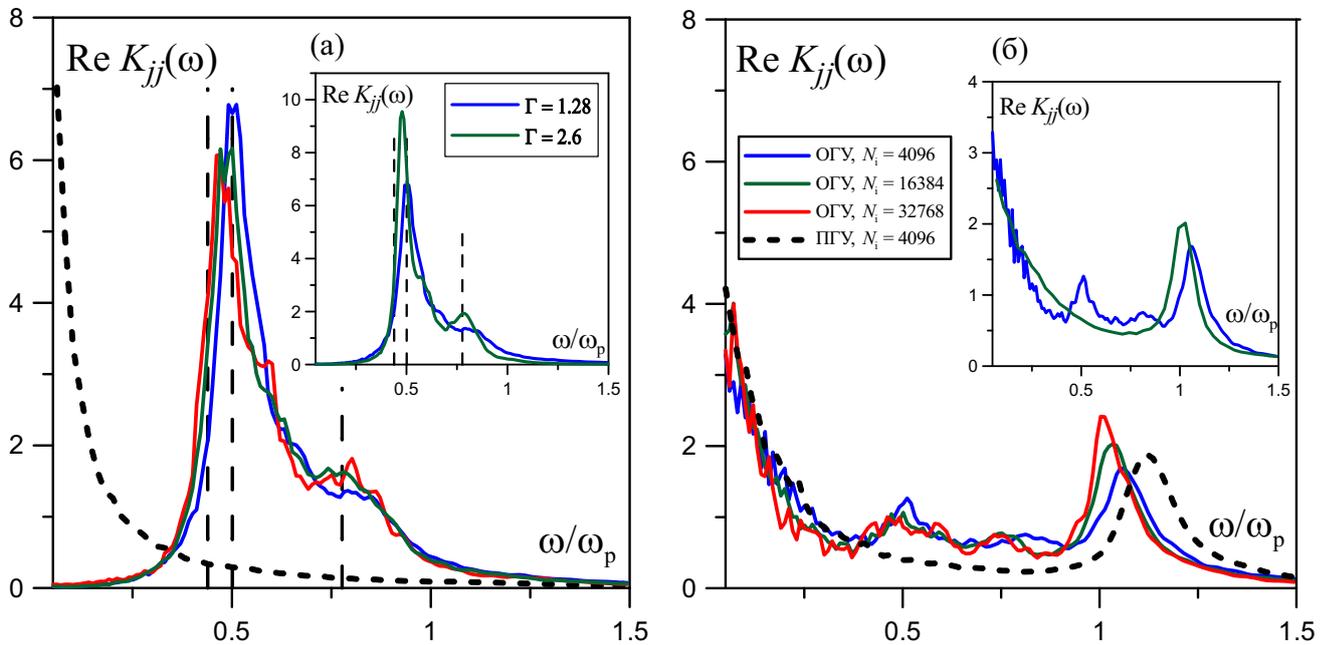


Рис. 2.19. Спектр АФТ, рассчитанный для всей ячейки (а) и для внутренней области с линейным размером $L/2$ (б): сплошные линии — расчеты для ОГУ с различным числом частиц (значения N_i указаны на графике), штриховая кривая — расчет для ПГУ. Вертикальные штриховые линии показывают положения резонансов для кубической ячейки. Параметры плазмы на основном графике: $\Gamma = 1.28$, $T = 3 \cdot 10^4$ К, на вставках показано сравнение результатов для $\Gamma = 1.28$ и $\Gamma = 2.6$.

Данный результат несложно понять, так как в случае ОГУ движение электронов также создает избыточный заряд (рисунок 2.20), который в данном случае находится не на воображаемых, а на реальных границах ячейки. Отличие от случая рассмотренного в разделе 2.3, кроме используемой модели взаимодействия частиц, заключается в том, что создаваемое зарядами среднее поле уже не является однородным, поэтому частота колебаний будет отличаться от ω_p .

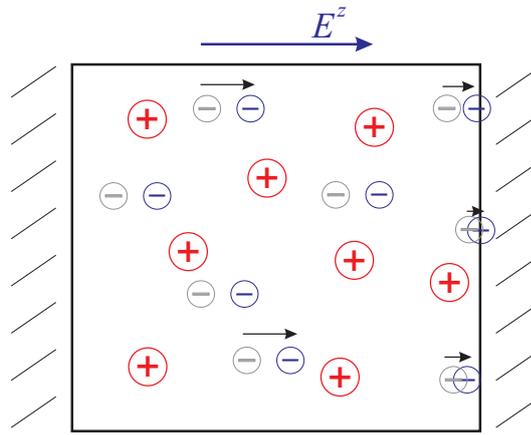


Рис. 2.20. Схематическое изображение накопления избыточного заряда на границах ячейки и появления среднего поля при использовании ОГУ.

Резонансы, наблюдаемые на рисунке 2.19а для ОГУ, напоминают колебания Ми, типичные для ионизованных кластеров. В случае сферической системы частота этих колебаний составляет $\omega_{\text{Mie}} = (4\pi e^2 n_i / (3m_e))^{1/2} = \omega_p / 3$. Для кубической ячейки ситуация становится сложнее — в этом случае спектр состоит из нескольких линий на частотах $0.43\omega_p$, $0.50\omega_p$ и $0.79\omega_p$ [539]. Эти частоты отмечены на графиках вертикальными штриховыми линиями. Как видно из рисунка, максимумы $K_{jj}(\omega)$ и указанных частотах хорошо совпадают, при этом положения максимумов слабо зависят от параметра неидеальности или числа частиц в системе.

На рисунке 2.19б показан спектр АФТ, рассчитанный по внутренней области расчетной ячейки, центр которой совпадает с центром основной ячейки, а линейный размер по каждой оси в два раза меньше. Как было отмечено выше, результат расчета потенциальной энергии и давления для такой области хорошо согласуется с расчетом для всей ячейки с ПГУ. В случае автокоррелятора тока ситуация меняется. С одной стороны, практически пропадают явно выраженные на рисунке 2.19а максимумы, соответствующие модифицированным колебаниям Ми. С другой стороны, на спектре появляется максимум вблизи плазменной частоты. Этот максимум, по-видимому, следует отнести к продольным ленгмюровским волнам, возникающим в плазме и наблюдаемых также на динамическом структурном факторе.

Как было отмечено выше, радиус экранирования в неидеальной плазме сравним со средними межчастичным расстоянием, поэтому сокращение размера об-

ласти, по которой рассчитывается АФТ, в два раза оказывается достаточным для того, чтобы поле во внутренней области практически не зависело от граничных условий и определялось только внутренними полями плазмы. Это приводит к тому, что, как видно из рисунка 2.19, результаты для ОГУ и ПГУ практически совпадают. Таким образом, применение ОГУ несколько затрудняет расчет динамической проводимости по методике, описанной в начале данной главы, из-за наличия дополнительных мод колебаний, связанных с накоплением заряда на границах ячейки. Однако, выделение внутренней области позволяет получить сходные результаты для различного типа граничных условий, хотя и снижает статистическую точность.

2.5. Выводы ко второй главе

Несмотря на то, что расчеты проводимости на основе автокорреляционной функции тока были выполнены еще в первых работах по моделированию неидеальной электрон–ионной плазмы методом классической МД, остается немало вопросов относительно интерпретации результатов этих компьютерных “экспериментов”. Одним из таких вопросов является переход к длинноволновому пределу в расчете динамической проводимости, которая необходима для определения коэффициента отражения и поглощения лазерного излучения при взаимодействии с плазмой. Из-за конечности расчетной ячейки и используемых в большинстве расчетов периодических граничных условий эта задача не является тривиальной.

В работе представлена оригинальная методика добавления в МД модель среднего поля, которая позволила провести теоретический анализ данной проблемы. Было показано, что результаты, полученные в рамках этой модели, соответствуют продольной или внутренней проводимости, в то время как стандартный метод МД моделирования с периодическими граничными условиями позволяет получить поперечную или внешнюю проводимость. Предложенные аналитические выражения, связывающие как продольную, так и поперечную проводимость с эффективной частотой столкновений позволили подтвердить, что результаты обоих расчетов дают одинаковую зависимость эффективной частоты столкновений от частоты возмущающего поля, что означает соответствие их длинноволновому пределу.

С использованием указанных результатов были рассчитаны значения статической и динамической проводимости неидеальной плазмы со значением параметра неидеальности $0.1 - 5$. Определена высокочастотная асимптотика эффективной частоты столкновений для модельного псевдопотенциала Кельбга, а также зависимость результатов от температуры, являющейся параметром данного потенциала.

Дополнительно проведен анализ спектра автокоррелятора тока для системы с отражающими граничными условиями. Показано, что эти результаты могут использоваться для расчета продольной проводимости при использовании внутренней области расчетной ячейки. Данные результаты имеют значение для развития метода МДВП, описанного в главе 5.

Результаты данной главы опубликованы в [1–3, 21, 22].

Глава 3

Релаксационные процессы в неидеальной электрон–ионной плазме

В предыдущей главе были рассмотрены свойства неидеальной электрон–ионной плазмы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия. Однако, такое состояние неидеальной плазмы является скорее исключением или удобной теоретической моделью, так как в экспериментальных условиях создание неидеальной плазмы, как правило, связано с быстропротекающими процессами выделения энергии и последующей релаксации, поэтому интерпретация наблюдаемых параметров плазмы должна выполняться с учетом возможных эффектов неравновесности.

В разделе 1.1 уже рассматривались примеры неравновесных сред, таких как плазма, генерируемая фемтосекундными лазерными импульсами, плазма за фронтом ударной волны, прикатодная плазма, электровзрыв проводников и др. Работы по изучению релаксации в неидеальной плазме с помощью аналитических моделей [403–407] и компьютерного моделирования [200,363,377,381,382,389,390,402] показали, что в ходе установления равновесия имеют место особенности, не поддающиеся описанию классической теорией, поэтому роль компьютерного моделирования здесь довольно велика.

Как было отмечено ранее, не все методы компьютерного моделирования способны описывать неравновесные среды. В основе подхода Томаса-Ферми, классического и квантового методов Монте-Карло заложено предположение о термодинамическом равновесии. Метод квантовой молекулярной динамики, основанной на ТФП, позволяет рассматривать неравновесную динамику ионов, однако состояние электронной системы по-прежнему считается равновесным. В этой связи возможность исследовать неравновесные состояния и релаксационные процессы с помощью классической МД является неоспоримым преимуществом этого метода.

В данной главе представлены результаты исследования различного типа неравновесных систем и релаксационных процессов с помощью МД моделирования. В первую очередь речь идет о пространственно ограниченных областях

плазмы, возникающий при воздействии на конденсированные мишени высокоэнергетичных многозарядных ионов или электрических разрядов. В этом случае на границе плазма–вакуум или плазма–конденсированное вещество происходит формирование так называемого двойного электрического слоя. Форма этого слоя и скорость его установления играют важную роль в интерпретации экспериментальных данных.

3.1. Формирование двойного электрического слоя на границе плазма–вакуум

Рассмотрим для начала модельную задачу формирования двойного электрического слоя на плоской границе плазма–вакуум, которая ввиду своей простоты наилучшим образом подходит для теоретического анализа.

Здесь и в последующих разделах данной главы применяется одинаковая схема расчета релаксационных процессов, описанная в [530]. Сначала система частиц выводится на равновесие с заданной температурой T_0 с помощью термостата, после чего термостат отключается и выполняется расчет опорной равновесной МД траектории с периодическими граничными условиями, как это было описано в предыдущей главе. Для инициирования релаксации на опорной траектории выбираются моменты времени t_k , отстоящие друг от друга на интервал порядка времени динамической памяти τ_m [388] (рисунок 3.1). Использование данного интервала обеспечивает статистическую независимость выбранных конфигураций частиц в фазовом пространстве скоростей и координат. Затем в каждой из таких конфигураций равновесие одинаковым образом нарушается (например, убираются граничные условия по одной из осей), после чего выполняется расчет релаксации системы к равновесию. Полученные на каждой из релаксационных траекторий зависимости исследуемых величин от времени $A_k(t)$ усредняются по ансамблю начальных состояний $\bar{A}(t) = \langle A_k(t) \rangle_k$.

Эта схема удобна в том числе для проведения расчетов на параллельных вычислительных кластерах, где каждая из релаксационных траекторий может независимо рассчитываться на отдельном процессоре, что обеспечивает эффективность

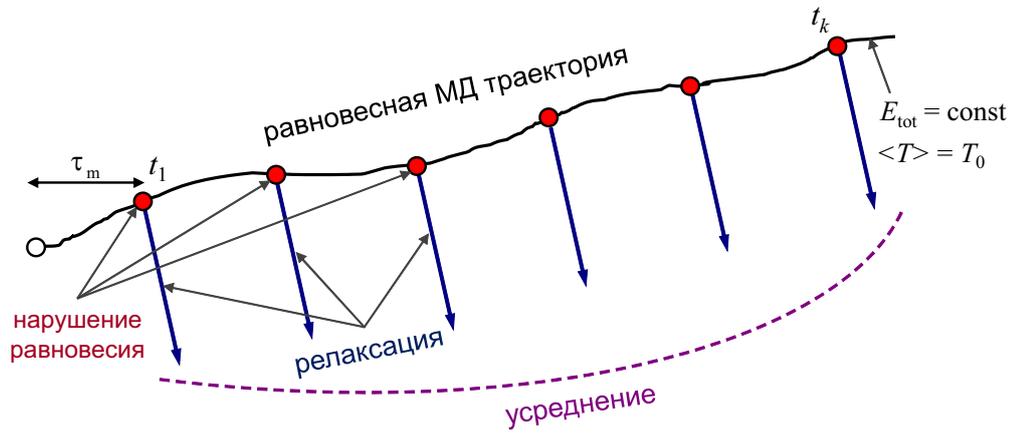


Рис. 3.1. Схема моделирования релаксационных процессов: создание опорной равновесной МД траектории, выбор начальных точек для создания неравновесного состояния t_k , моделирование релаксации, усреднение по ансамблю; τ_m — время динамической памяти.

распараллеливания, близкую к 100 %.

Для генерации опорных равновесных траекторий использовался набор начальных состояний плазмы, указанный в таблице 3.1. Заряд ионов принимался равным $Z = 1$. Взаимодействие между частицами описывалось посредством модифицированного потенциала Кельбга (1.18).

Для моделирования процесса формирования двойного электрического слоя на границе плазма–вакуум положения ионов фиксировались, а для электронов отключались периодические граничные условия по оси z . В результате происходила частичная эмиссия электронов с образовавшихся открытых поверхностей плазмы. Эмиссия происходила до тех пор, пока поле нескомпенсированного заряда ионов в основной части ячейки не препятствовало дальнейшему вылету электронов. Результаты для положительного и отрицательного направлений оси z усреднялись. Размер ячейки по оси L_z выбирался таким образом, чтобы концентрация электронов в центре ячейки оставалась близка к исходной n_{e0} .

Результаты установившегося профиля электронов при различных параметрах неидеальности показаны на рисунке 3.2 в полулогарифмическом и двойном логарифмическом масштабах. Координата $z = 0$ соответствует исходной границе ячейки. На рисунке 3.2а расстояние нормировано на классический радиус экранирования, в качестве которого здесь в последующих разделах данной главы используется величина $\lambda_D = (k_B T / (4\pi n_e e^2))^{1/2} = \sqrt{2} r_D$, так как ионы считаются неподвижными. Значения λ_D также указаны в таблице 3.1. Как видно из рисун-

Таблица 3.1. Параметры моделирования двойного электрического слоя на границе плазма–вакуум: T_e и n_{e0} — начальная температура и концентрация электронов, Γ и Θ — параметры неидеальности и вырождения, N_i — полное число ионов (электронов), $\lambda_D = \sqrt{2}r_D$ — классический радиус экранирования, τ_e — период ленгмюровских колебаний, τ_{rel} — характерное время установления двойного слоя.

№	$T_e, 10^3 \text{ K}$	$n_{e0}, 10^{21} \text{ см}^{-3}$	Γ	Θ	N_i	$\lambda_D, \text{ нм}$	$\tau_e, \text{ фс}$	$\tau_{rel}, \text{ фс}$
1	30	0.011	0.2	142	1024	36.0	33.5	40 ± 10
2	30	0.173	0.5	22.9	512	9.10	8.48	22 ± 6
3	30	1.38	1	5.72	256	3.22	3.00	8 ± 2
4	30	11.1	2	1.43	256	1.14	1.06	2.0 ± 0.5

ка, ширина двойного слоя оказывается зависящей только от величины λ_D при всех исследованных значениях начальной плотности. Это может быть следствием уменьшения степени неидеальности в области двойного слоя и отсутствием эффектов неидеальности. Абсолютные значения ширины слоя можно оценить из рисунка 3.2а, где расстояние указано в ангстремах. Рисунок также показывает участок степенного спада концентрации электронов $n_e \sim z^\alpha$ с $\alpha \approx -1$.

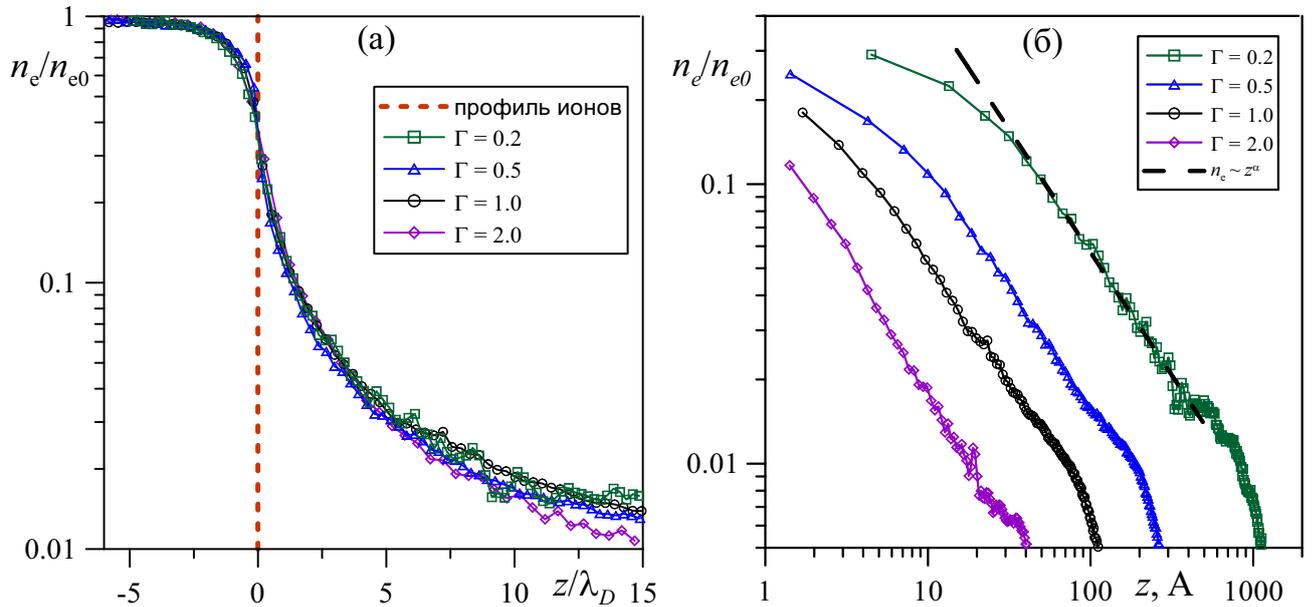


Рис. 3.2. Распределение концентрации электронов вдоль оси z , где $z = 0$ — начальное положение границы плазма–вакуум: точки — МД моделирование для различной степени неидеальности (значения Γ указаны на графике), пунктирная линия на рисунке (б) — степенная аппроксимация.

В таблице 3.1 также приведено характерное время установления двойного слоя τ_{rel} . Видно, что это время уменьшается с ростом плотности плазмы и составляет примерно $\tau_{rel} \approx 2\tau_e$.

3.2. Формирование двойного электрического слоя вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги

3.2.1. Постановка задачи

Практически важным случаем, в котором проявляются свойства двойного электрического слоя на границе неидеальной плазмы, является плазма, образующаяся на поверхности металла в результате электрического пробоя высоковольтных устройств вакуумной электроники: микроволновых волноводов и резонаторов, используемых, например, для ввода энергии в современных ускорителях частиц. Явления пробоя приводят к разрушению внутренних поверхностей указанных устройств и преждевременному выходу их из строя. В ряде работ [78, 80] показано, что начальная стадия формирования пробоя связана с образованием плазмы вблизи металлической поверхности, находящейся в сильном электрическом поле.

В формировании плазмы участвует несколько процессов. Согласно модели [540] в первую очередь происходит распыление вещества поверхности под действием сильного электрического поля. Затем облако вылетевших атомов бомбардируется потоком электронов, ионизованных с поверхности и ускоренных на обратном полупериоде колебаний поля (в СВЧ устройствах). В результате этого получается слой ионизованной неидеальной плазмы, которая частично или полностью экранирует поверхность металла от внешнего поля. Характерная толщина плазменного слоя находится в нанометровом диапазоне. Вследствие экранировки дальнейшие процессы в приповерхностном слое определяются уже взаимодействием плазмы с металлом. Одним из таких процессов является образование униполярных дуг (*unipolar arcs*), приводящих к эрозии поверхности (рисунок 3.3) и выходу из строя микроволновых устройств. Альтернативным механизмом разрушения поверхности являются эктоны [77].

В данном подразделе рассматривается моделирование структуры и ширины двойного слоя в приповерхностной плазме, скорость установления равновесного распределения зарядов, а также величина поля и разность потенциалов на поверхности металла с учетом плазменной экранировки. Эти данные необходимы для

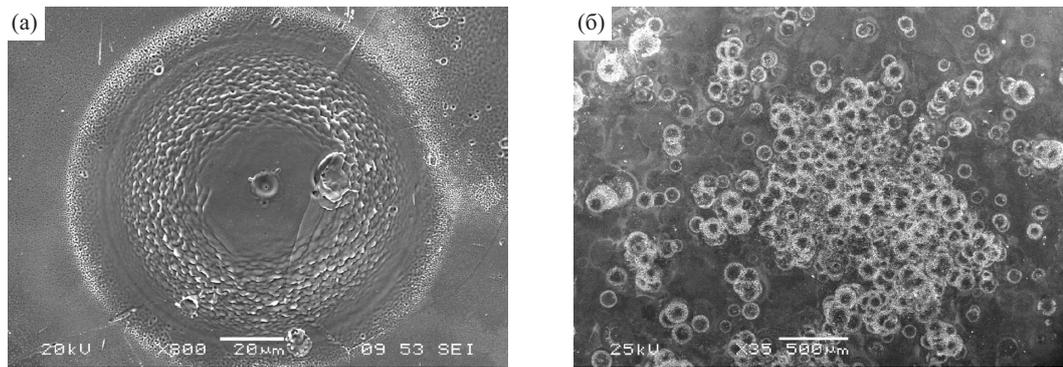


Рис. 3.3. Изображение поверхности медного катода, полученные с помощью сканирующей электронной микроскопии [79]. На рисунке видна субмикронная структура повреждений, полученных в результате воздействия единичной униполярной дуги (а) и множественных униполярных дуг (б).

понимания начального этапа формирования униполярной дуги.

Как показали расчеты [540], выполненные методом Particle-In-Cell, концентрация электронов в плазме вблизи неоднородностей поверхности, являющихся центрами эмиссии, достигает $n_e = 10^{20} \text{ см}^{-3}$. При температуре в диапазоне $T_e = 1 - 10 \text{ эВ}$ такая плазма является неидеальной с параметром неидеальности $\Gamma \sim 1$ и радиусом экранирования, сравнимым со средним межчастичным расстоянием. Для такой плазмы приближенное описание столкновительных процессов, используемое в методе Particle-In-Cell, является некорректным, поэтому актуальным является моделирование с применением метода классической МД, позволяющее изучить времена релаксации двойного слоя и исследовать экранировку поля металлической поверхности.

3.2.2. Описание метода моделирования

Для МД моделирования была рассмотрена однократно ионизованная невырожденная электрон–ионная плазма меди с параметром неидеальности $\Gamma = 0.05 - 4$. Электрон–ионное взаимодействие описывалось псевдопотенциалом с функцией ошибок (1.20) и значением параметра $\lambda_{ei} = 0.21 \text{ нм}$, обеспечивающим энергию основного состояния пары электрон–ион $V_{ei}(0) = -7.73 \text{ эВ}$, равную потенциалу ионизации меди. Электрон–электронное взаимодействие считалось кулоновским (1.13). Шаг по времени варьировался в интервале $\Delta t = 0.0001 - 0.01 \text{ фс}$.

В качестве начального состояния использовалась полученная в результате предварительного расчета равновесная пространственно однородная плазма с па-

раметрами, указанными в таблице 3.2. Как и в предыдущем подразделе, для каждого набора параметров из таблицы 3.2 генерировалась последовательность статистически независимых микросостояний (наборов координат и скоростей частиц), которые в дальнейшем брались в качестве начальных условий для моделирования установления двойного электрического слоя. Окончательные результаты усреднялись по указанным начальным состояниям.

Таблица 3.2. Параметры моделирования приповерхностной плазмы: T_e — начальная температура электронов, n_e — концентрация электронов (ионов), L_z и L_x — размеры ячейки в продольном и поперечном направлениях, N_i — полное число ионов (электронов), Γ — параметр неидеальности, Θ — параметр вырождения, $\lambda_D = \sqrt{2}r_D$ — классический радиус экранирования.

№	T_e , эВ	n_e , 10^{21} см $^{-3}$	L_x , нм	L_z , нм	N_i	Γ	Θ	λ_D , нм
1	1.0	0.0001	120	360	518	0.11	1272	23.5
2	1.0	0.001	55	165	499	0.23	274	7.43
3	1.0	0.01	25	75	468	0.50	59.0	2.35
4	1.0	0.1	11	33	399	1.08	12.7	0.74
5	1.0	1.0	5	15	375	2.32	2.74	0.24
6	1.0	5.0	2.8	8.4	329	3.97	0.94	0.11
7	10	0.01	25	75	468	0.05	590	7.43
8	10	1.0	5	15	375	0.23	27.4	0.74
9	10	100	1	2.5	300	1.08	1.27	0.07

Для исследования двойного электрического слоя вблизи интерфейса плазма–металл одна из сторон МД ячейки рассматривалась в качестве металлической поверхности. Схема ячейки показана на рисунке 3.4, где металлическая поверхность соответствует координате $z = 0$. В расчете учитывался суммарный заряд поверхности: при попадании на нее электрона он адсорбировался, в результате чего к поверхности добавлялся соответствующий отрицательный заряд $q_{\text{surf}} \leftarrow q_{\text{surf}} - e$. Поверхностная плотность заряда рассчитывалась как $\sigma = q_{\text{surf}} / (L_x L_y)$, где L_x , L_y — размеры ячейки по осям x и y ($L_x = L_y = 2a$).

В зависимости от заряда поверхности в ячейке создавалось электрическое поле, направленное вдоль оси z

$$E^z(z) = 4\sigma \operatorname{arctg} \left(\frac{a^2}{z\sqrt{2a^2 + z^2}} \right). \quad (3.1)$$

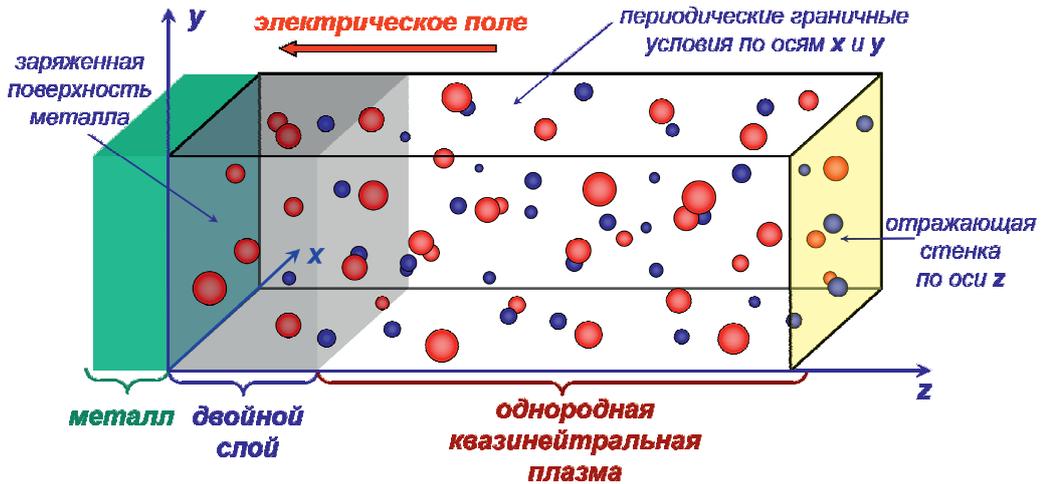


Рис. 3.4. Схема расчетной ячейки для моделирования приповерхностной электрон-ионной плазмы. Металлическая поверхность располагается слева. Затемнением показана область двойного электрического слоя.

В пределе $z \rightarrow 0$ это выражение переходит в формулу для однородно заряженной плоскости $E^z = 2\pi\sigma$, а на больших расстояниях $z \rightarrow \infty$ — в кулоновский потенциал $E^z = 4a^2\sigma/z$. Использование данного выражения вместо упрощенной модели $E^z = 2\pi\sigma$ является существенным, так как поле однородно заряженной плоскости не может быть экранировано зарядами. По мере накопления заряда поле E^z препятствует дальнейшему потоку электронов на поверхность, что в конечном итоге приводит к формированию стационарного двойного электрического слоя.

По осям x, y расчетная ячейка имела периодические граничные условия, движение частиц вдоль оси z ограничивалось лишь на большом расстоянии от поверхности L_z , заведомо превышающем ширину приповерхностного слоя плазмы. Такие граничные условия устанавливались в начале расчета для каждого указанного выше начального состояния, после чего наблюдалась релаксация системы к равновесию. Расчеты проводились с различными размерами расчетной ячейки для подтверждения того, что увеличение размеров не влияет на результат в пределах статистической ошибки.

Ионы в данном расчете считались неподвижными, так как их динамика не вносит существенного влияния на формирование двойного слоя в интервале времен, соответствующим электронной релаксации. В то же время при усреднении по начальным условиям использовались различные положения ионов.

Сохранение полной энергии обеспечивалось на уровне долей процента.

Уменьшение температуры электронов за счет адсорбции наиболее быстрых электронов плазмы поверхностью составляло 1 – 10 %.

3.2.3. Установление двойного электрического слоя

Перейдем теперь к результатам моделирования. Для рассматриваемых параметров плазмы резкое нарастание напряженности поля вблизи поверхности и установление двойного электрического слоя наблюдается на временах порядка 1 фс (рисунок 3.5а). На рисунке 3.5б показано формирование стационарного профиля электронной плотности вдоль оси z в процессе релаксации. Времена установления распределений электронов внутри ячейки примерно соответствуют описанным в таблице 3.2. Полученные стационарные распределения концентрации электронов и ионов вдоль оси z представлены на рисунке 3.6.

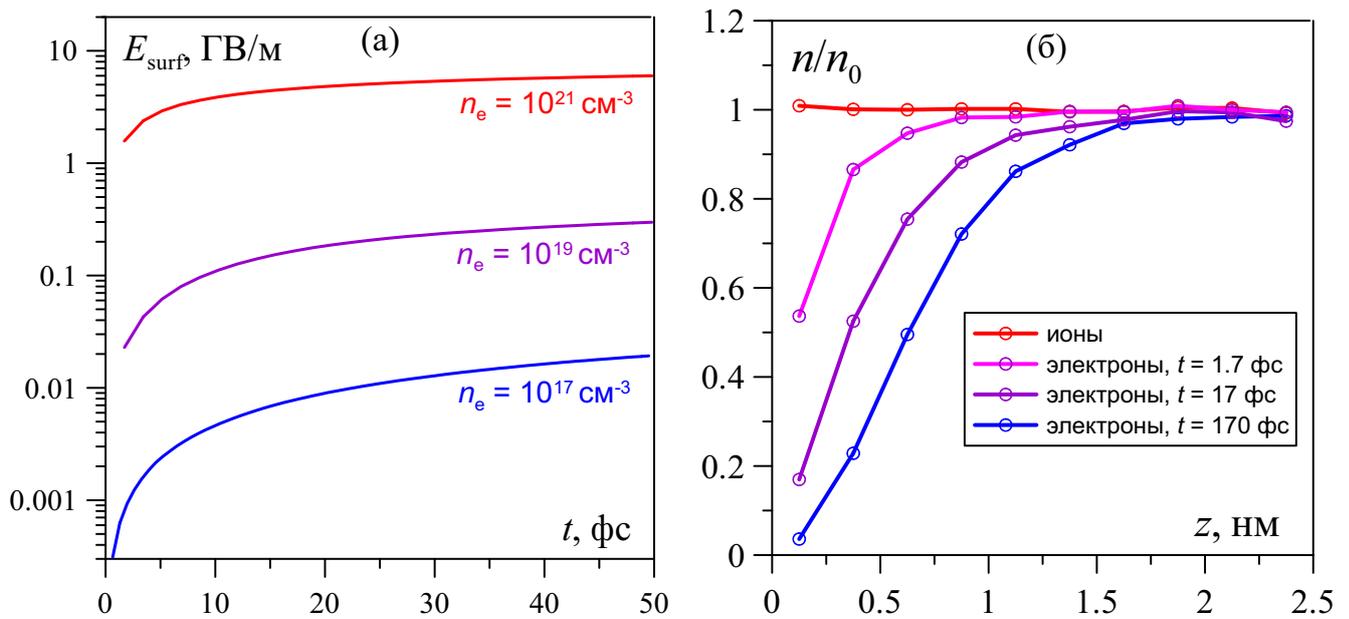


Рис. 3.5. (а) Зависимость напряженности электрического поля E_{surf} вблизи металлической поверхности от времени для различных концентраций электронов в плазме (значения концентраций указаны на графике), $T_e = 1 \text{ эВ}$. (б) Профиль концентрации электронов, отнесенной к начальной концентрации n_0 , вдоль оси z для различных моментов времени, указанных на графике, $T_e = 1 \text{ эВ}$, $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Поскольку ионы неподвижны в основной части расчета, их распределение на рисунке 3.6 в среднем однородно и соответствует исходным конфигурациям, полученным на предварительном этапе моделирования пространственно однородной плазмы. Электроны же за счет взаимодействия с металлической поверхностью

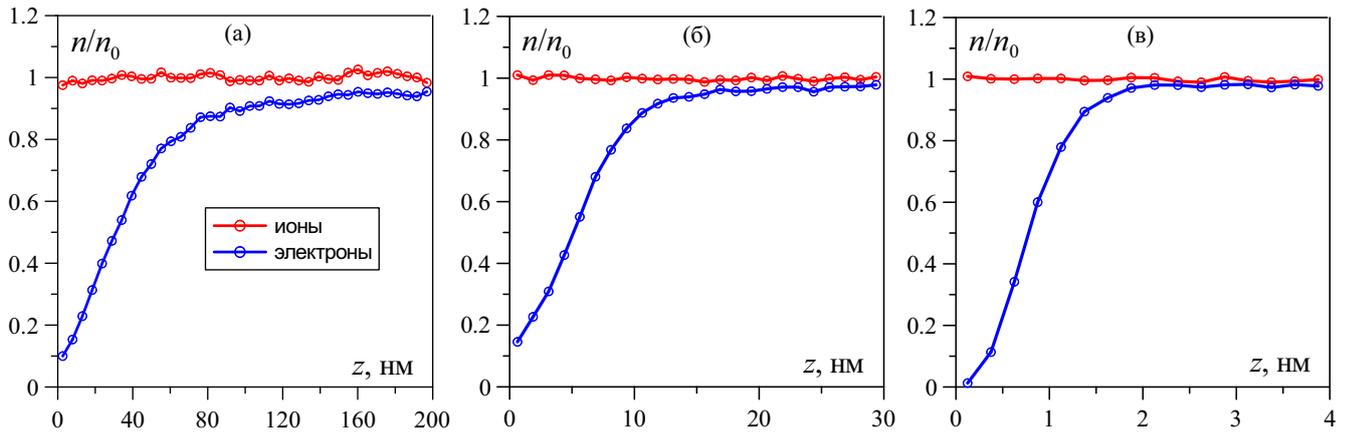


Рис. 3.6. Профили плотности электронов и ионов для конечного стационарного состояния двойного электрического слоя в зависимости от средней начальной концентрации электронов: (а) $n_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, (б) $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, (в) $n_e = 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Все расчеты приведены для $T_e = 1 \text{ эВ}$.

формируют хорошо наблюдаемый слой приповерхностной плазмы с положительным зарядом (двойной электрический слой).

Распределение плотности заряда вдоль оси z определяется разницей между концентрациями ионов и электронов. На рисунке 3.6 она представлена в полулогарифмическом масштабе. Из рисунка видно, что, начиная с некоторого удаления от поверхности, наблюдается экспоненциальный спад плотности заряда с расстоянием $\sigma(z) \sim e^{-z/\lambda_{\text{exp}}}$. При высоких плотностях плазмы экспоненциальному спаду предшествует неэкспоненциальная область.

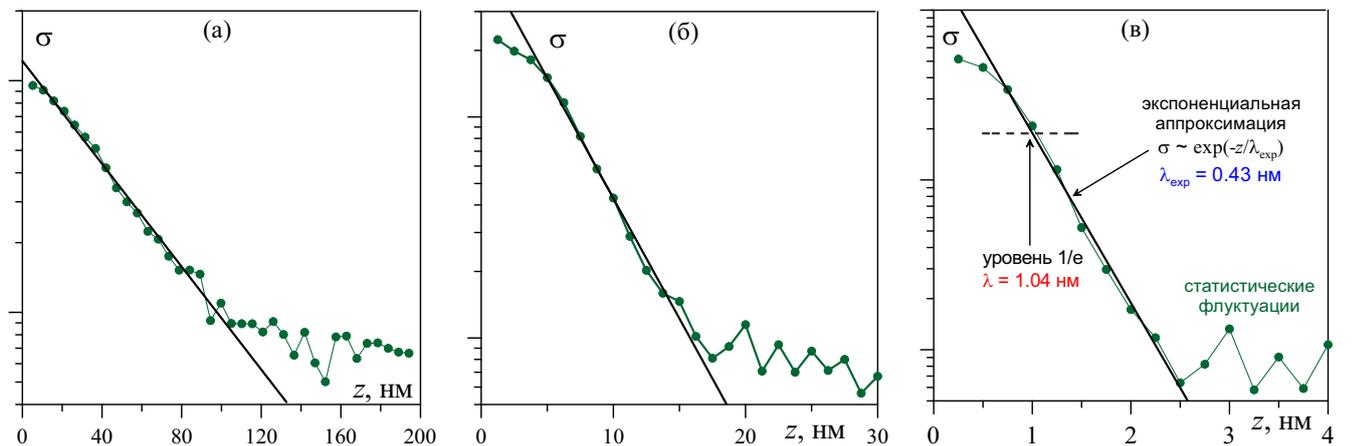


Рис. 3.7. Распределение заряда в двойном слое (произвольные единицы): точки — результаты МД моделирования, сплошные линии — экспоненциальная аппроксимация. Параметры плазмы на рисунках (а)–(в) соответствуют рисункам 3.6(а)–(в).

3.2.4. Зависимость ширины двойного слоя от параметров плазмы

Эффективную ширину двойного слоя можно определить двумя способами. В первом случае ее можно считать равной показателю экспоненты λ_{exp} , во втором — расстоянию от поверхности λ , на котором плотность заряда спадает до величины $\sigma(\lambda) = \sigma(0)/e$, где e — основание натурального логарифма (см. вставку на рисунке 3.6в). Обе величины совпадают при отсутствии неэкспоненциального участка спада заряда вблизи поверхности.

На рисунке 3.8 показана зависимость величин λ и λ_{exp} от средней концентрации электронов. Как видно из рисунка, величина λ_{exp} следует дебаевской зависимости от концентрации $\lambda_{\text{exp}} \sim n_e^{-1/2}$, в то время как фактическая ширина двойного слоя λ имеет иную зависимость. Интерполяционные формулы для полученных из МД значений указанных величин имеют вид:

$$T_e = 1 \text{ эВ} : \quad \lambda_{\text{exp}} = 1.7\lambda_D, \quad \lambda[\text{нм}] = 1.0 \cdot 10^{11} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.405}, \quad (3.2)$$

$$T_e = 10 \text{ эВ} : \quad \lambda_{\text{exp}} = 1.7\lambda_D, \quad \lambda[\text{нм}] = 3.18 \cdot 10^{12} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.449}. \quad (3.3)$$

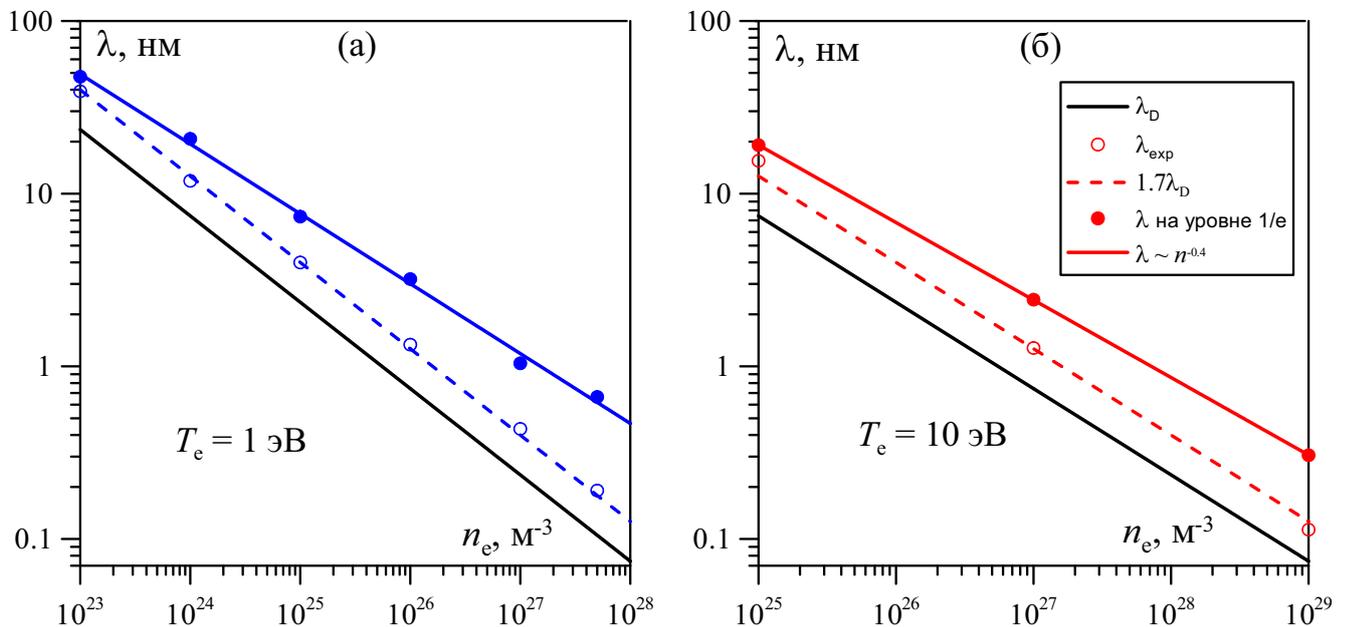


Рис. 3.8. Ширина двойного слоя в зависимости от средней электронной концентрации для двух значений температуры: (а) $T_e = 1$ эВ; (б) $T_e = 10$ эВ. Закрашенные кружки и аппроксимирующая их сплошная линия — ширина двойного слоя по уровню $1/e$, незакрашенные кружки и аппроксимирующая их штриховая линия — скорость экспоненциального спада заряда вблизи поверхности (см. рисунок 3.7), сплошная черная линия — теоретическое значение дебаевского радиуса.

Отношения $\lambda_{\text{exp}}/\lambda_D$ и λ/λ_D показаны на рисунке 3.9 в зависимости от температуры, концентрации электронов и параметра неидеальности. Этот рисунок иллюстрирует тот факт, что с возрастанием электронной плотности радиус экранирования λ_D , традиционно используемый для оценки ширины двойного слоя, все менее соответствует фактическому значению ширины. Из рисунка 3.9б видно, что отношение λ/λ_D в указанном диапазоне параметров является в основном функцией параметра неидеальности Γ . Это подтверждает предположение о том, что неэкспоненциальный характер экранировки металлической поверхности является эффектом неидеальности плазмы.

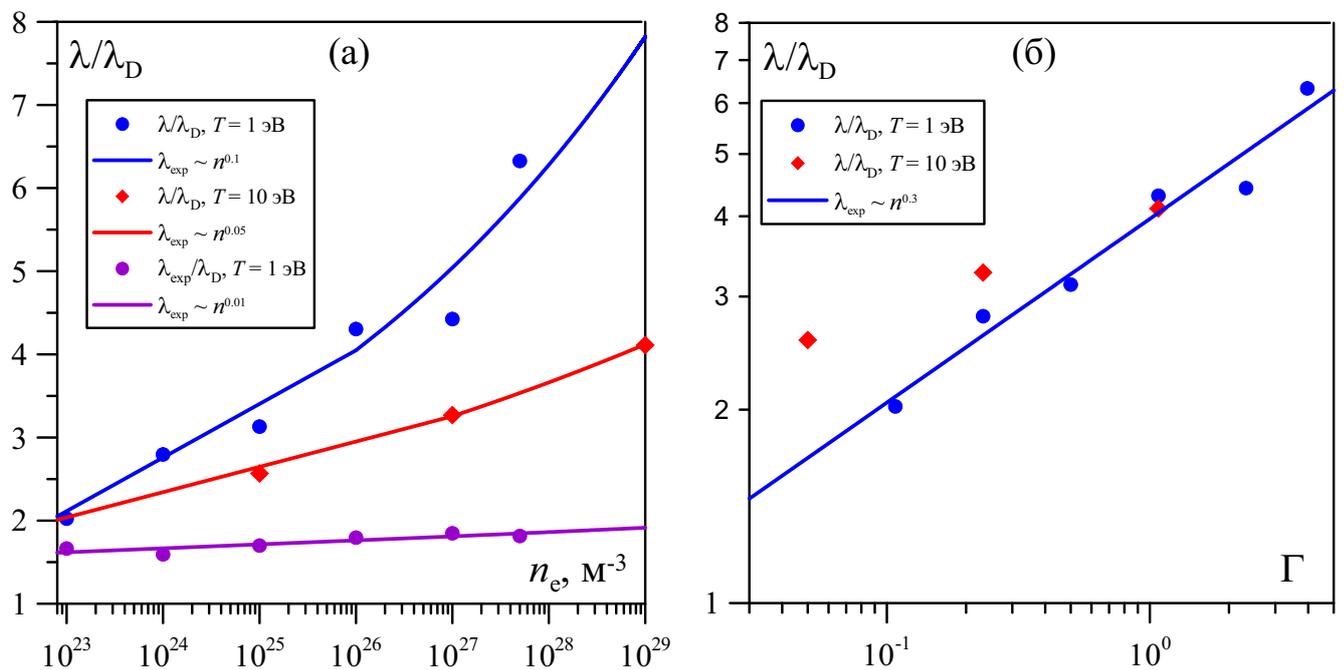


Рис. 3.9. Отношение ширины двойного слоя к классическому радиусу экранирования в зависимости от (а) концентрации электронов, (б) параметра неидеальности. Значения температур указаны на графиках.

3.2.5. Напряженность электрического поля вблизи поверхности

Напряженность электрического поля вблизи поверхности $E = E^z(z \rightarrow 0)$ в зависимости от параметров плазмы показана на рисунке 3.10. Аппроксимация

данных МД моделирования (пунктирные линии) задается выражениями

$$T_e = 1 \text{ эВ} : \quad E[\text{ГВ/м}] = 2.57 \cdot 10^{-15} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.577}, \quad (3.4)$$

$$T_e = 10 \text{ эВ} : \quad E[\text{ГВ/м}] = 1.21 \cdot 10^{-13} (n_e[\text{м}^{-3}])^{-0.531}. \quad (3.5)$$

Сплошные линии на рисунке 3.10 соответствуют оценкам [78], которые, как видно из рисунка, дают завышенное значение напряженности. Однако, если в формуле (2) из [78], которая имеет вид

$$E = \frac{V_f}{\lambda_D} = (\pi n_e k_B T_e)^{1/2} \log[m_i / (2\pi m_e)], \quad (3.6)$$

выполнить замену дебаевского радиуса λ_D на результат $\lambda(n_e, T_e)$, полученный из МД моделирования

$$E = V_f / \lambda(n_e, T_e), \quad (3.7)$$

то оценки напряженности, показанные на рисунке крестиками, существенно лучше согласуются с непосредственными результатами МД моделирования. Это подтверждает самосогласованность модели и в совокупности с интерполяционными формулами (3.4) – (3.5) дает универсальный алгоритм расчета напряженности поля для различных параметров плазмы.

На рисунке 3.11 показан также потенциал плазмы вблизи поверхности, рассчитанный с использованием простого соотношения $\phi = E/\lambda$, в котором и величина электрического поля E , и длина двойного слоя λ получены из МД моделирования. Более строгий результат можно получить путем интегрирования распределения электрического поля в плазме, однако это требует более точного расчета плотности заряда вдали от поверхности.

Полученные результаты МД моделирования могут быть использованы в качестве входных параметров для методов более высокого уровня, например Particle-In-Cell, в рамках многомасштабной модели.

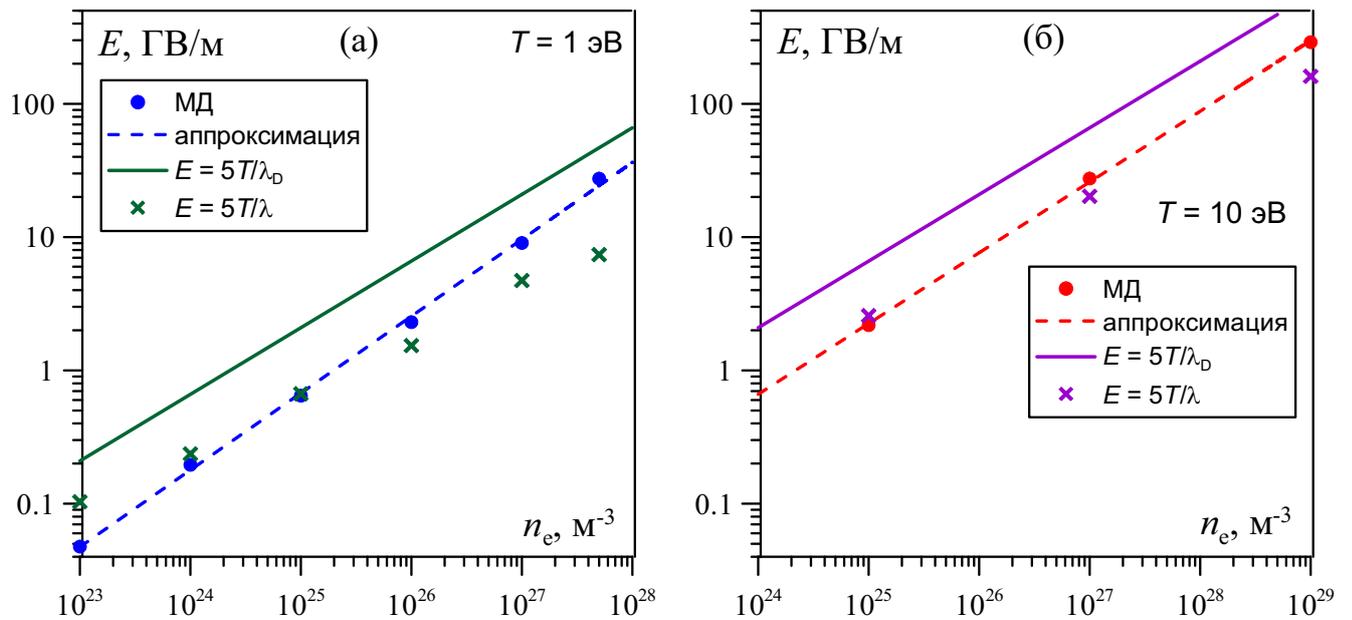


Рис. 3.10. Напряженность электрического поля вблизи поверхности в зависимости от концентрации электронов и температуры. Результаты МД моделирования (кружки) и аппроксимирующие их зависимости (штриховые линии) сравниваются с исходной моделью (3.6) (сплошные линии) и с модифицированной моделью (3.7), в которой дебаевский радиус заменен на фактическую ширину двойного слоя, полученную из МД моделирования (крестики). Температуры для рисунков (а) и (б) указаны на графиках.

3.3. Релаксация неидеальной плазмы, образованной одиночным многозарядным ионом в конденсированной мишени

3.3.1. Постановка задачи

В разделе 1.1.7 уже обсуждались работы по воздействию потоков заряженных частиц на вещество, приводящих к образованию неидеальной плазмы или разогретого плотного вещества. Как правило, речь в данных работах идет об интенсивных потоках ионов, энергия которых поглощается в среде, формируя плазменное образование макроскопического размера. Однако, не менее важно рассмотреть процесс взаимодействия одиночного иона с конденсированной мишенью, не приводящий к ионизации всей мишени или значительное ее части. Исследования этих процессов важны для оценки повреждений конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторных установок при облучении их продуктами реакций, в медицинских приложениях при создании методов ионной терапии опухолевых процессов и в других приложениях [541, 542].

Если энергия налетающего иона достаточно велика, то при его проникнове-

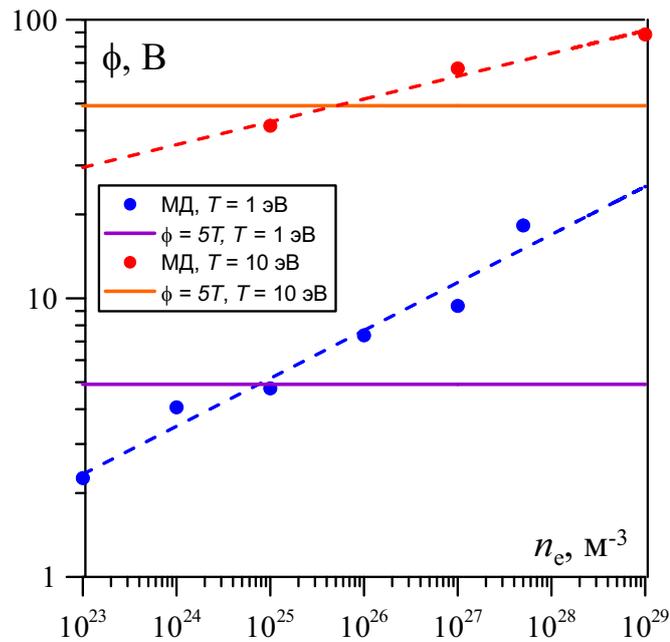


Рис. 3.11. Потенциал плазмы вблизи поверхности в зависимости от концентрации электронов при различных температурах (значения температур указаны на графике): точки — результаты МД моделирования, пунктир — аппроксимация МД данных, сплошные линии — теоретическая оценка [78].

нии в твердотельную мишень происходит образование канала, в котором выделившаяся за счет взаимодействия с атомами мишени энергия приводит к ионизации вещества и формированию неравновесной неидеальной плазмы (рисунок 3.12). Свойства такой среды достаточно сильно отличаются от пространственно однородной плазмы, рассмотренной в предыдущей главе. Релаксация образовавшихся ионов приводит в конечном счете к образованию дефекта (ионного трека), а накопление треков от последовательного облучения большим количеством ионов может существенным образом изменить механические и другие свойства образца. При этом наблюдаемое излучение ионов среды в рентгеновском диапазоне, вызванное их рекомбинацией и внутриатомными переходами, может быть использовано для диагностики и верификации теоретических моделей [257–259].

Таким образом, процесс образования ионного трека включает образование возбужденных ионов мишени и свободных электронов вследствие многократной ионизации полем налетающего быстрым иона, термализацию электронов с образованием квазиравновесной неидеальной плазмы и, наконец, релаксацию возбужденных состояний ионов с излучением рентгеновских спектральных линий. В качестве вещества мишени рассматривались атомы с зарядовым числом 10 – 20, т.е.

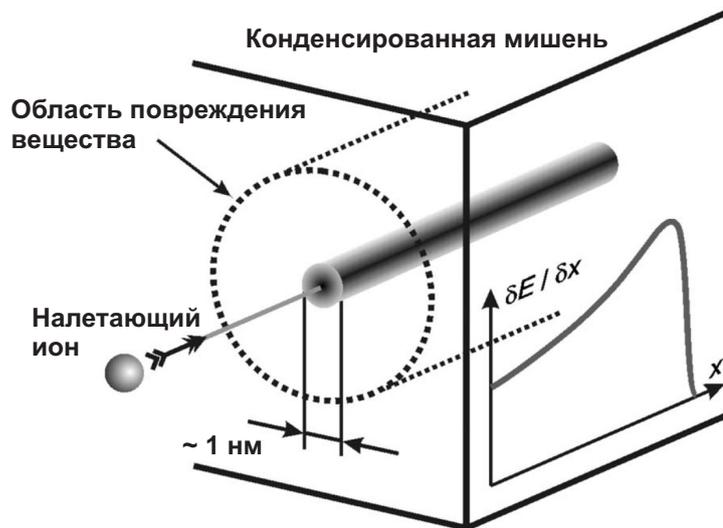


Рис. 3.12. Схематическое изображение плазменного канала и области повреждения вещества, образованных воздействием многозарядного тяжелого иона на конденсированную мишень.

имеющие заполненные К- и L-оболочки, а также несколько электронов в M-оболочке.

В данном разделе рассмотрена модель образования и релаксации неидеальной плазмы. Информация о характерных временах релаксационных процессов в плазме, полученная на основе МД моделирования, используется затем для корректировки модели излучения атомных спектров.

3.3.2. Оценка начального состояния плазмы

Оценки размера области ионизации вещества под воздействием многозарядного тяжелого иона основываются на теоретических моделях, описанных в обзоре [541]. Поскольку диагностика может быть выполнена только в рентгеновском диапазоне, в первую очередь необходимо оценить область образования ионов с вакансиями в К-оболочке, так как именно они генерируют впоследствии наблюдаемое рентгеновское излучение. Эти атомы образуются в центральной области трека, тогда как ионы с вакансиями в L- и M-оболочках — ближе к периферии.

В первую очередь мы будем ориентироваться на экспериментальные работы [257–259], в которых исследовалось воздействие ионов Ni^{+14} с энергией 3 – 11 МэВ/нуклон на аэрогельные SiO_2 мишени плотностью 0.15 г/см^3 . В этом случае расчеты показывают, что область образования К-вакансий можно рассмат-

ривать в форме цилиндра диаметром $1 - 1.5 \text{ \AA}$ и длиной 200 мкм . При этом энерговыделение в пересчете на одну молекулу мишени составит порядка $7 - 15 \text{ КэВ}$, из которых порядка $5 - 6 \text{ КэВ}$ будет потрачено на ионизацию атомов и образование К-вакансии, а оставшиеся $1 - 10 \text{ КэВ}$ могут быть переданы возникшим свободным электронам плазмы. Учитывая, что при ионизации М- и L-оболочек атома Si и двух атомов O может образоваться порядка $16 - 24$ свободных электронов, их средняя энергия должна лежать в диапазоне $40 - 400 \text{ эВ}$. Однако, эта оценка не учитывает, что основное выделение энергии происходит вблизи пика Брегга. Уточненная модель дает значение энергии $10 - 100 \text{ эВ}$ на электрон. Длительность первичной ионизации атомом мишени составляет порядка $10^{-3} - 10^{-2} \text{ фс}$.

3.3.3. Параметры МД моделирования

Задачами МД моделирования в данном случае является оценка уменьшения концентрации свободных электронов за счет их диффузии из области ионного трека, времени установления равновесного распределения электронов по скоростям, времени плавления ионной решетки и скорости рекомбинации электронов на высоколежащие атомные уровни.

Для выполнения этой оценки будем считать, что к моменту окончания ионизации средний заряд ионов равен $Z = 2 - 4$, концентрация электронов составляет $n_e = 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, а начальная их температура $T_e \leq 50 \text{ эВ}$. Это соответствует значению параметра неидеальности $\Gamma \geq 0.27$, что говорит о неприменимости теории идеальной плазмы для расчета релаксационных процессов [381, 402].

3.3.4. Равновесное распределение электронов

Для МД моделирования было выбрано расположение ионов с зарядами $Z = 2$ и $Z = 4$ в плоскости, ортогональной направлению движения иона, как показано на вставке в рисунок 3.13а. Ионы расхоложены в узлах гексагональной кристаллической решетки с периодом a . Ячейка МД моделирования периодически продолжается в направлении движения налетающего иона (ось z), тогда как по осями x, y ограничения на движения частиц отсутствуют. Такая модель весьма приближенно описывает структуру SiO_2 мишени, однако она достаточна для оценки времен ре-

лаксации по порядку величины и качественного описания эволюции электронов в плазме.

На том же рисунке показано полученное из МД моделирования установившееся радиальное распределение электронов при температурах 14 и 25 эВ. Ионы в этом расчете можно считать неподвижными. Максимум распределения при $r = a$ соответствует расположению внешних ионов. Интегрирование этой зависимости показывает, что общее число электронов в области $r < 1.5a$ составляет не менее 85 % от общего числа электронов (рисунок 3.13б). Данный результат означает, что несмотря на частичную диффузию электронов из области ионизации, большинство из них удерживается кулоновскими силами, формирующими двойной электрический слой. Концентрация электронов в этой области оказывается достаточной для того, чтобы электрон–ионные столкновения оказали заметное влияние на релаксацию возбужденных состояний ионов.

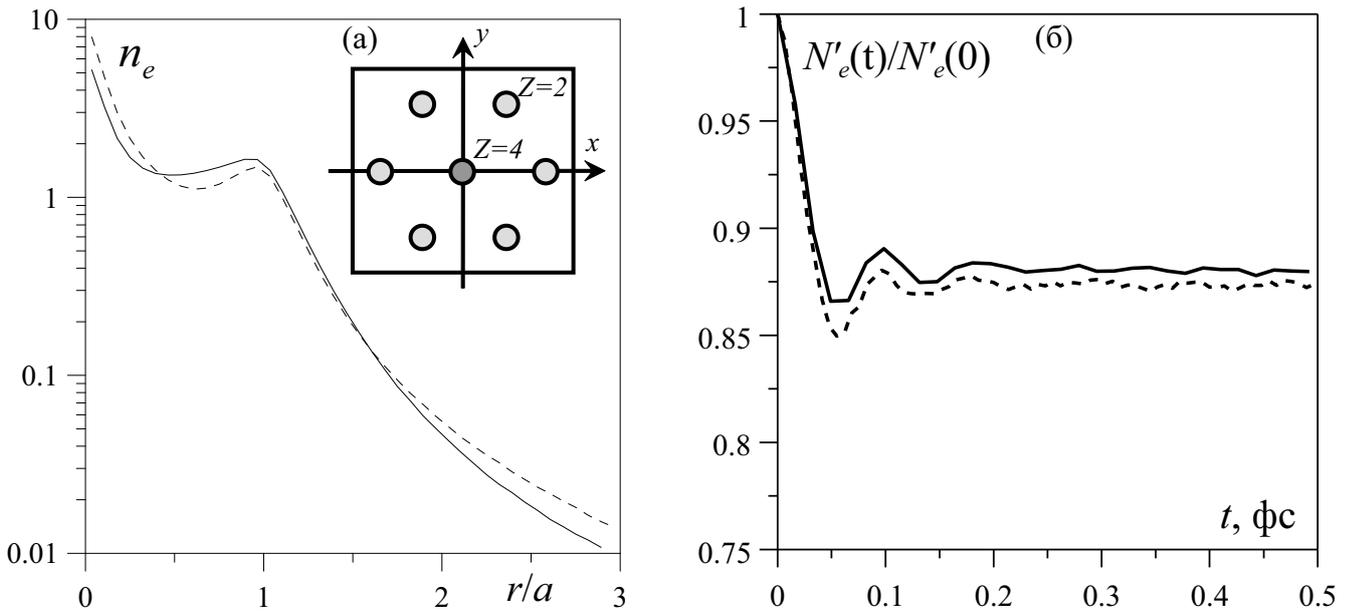


Рис. 3.13. (а) Стационарное радиальное распределение концентрации электронов в плоскости, ортогональной направлению движения иона; (б) зависимость полного числа электронов в цилиндрической области $r < 1.5a$ от времени по отношению к его начальному значению, полученные из МД моделирования: сплошная линия — при температуре электронов $T_e = 14$ эВ, пунктирная линия — $T_e = 25$ эВ. Расположение ионов в той же плоскости показано на вставке. Расстояние на рисунке (а) измеряется в средних межатомных расстояниях a .

3.3.5. Релаксация скоростей электронов

Второй задачей моделирования было исследование релаксации функции распределения электронов по скоростям. Для этого рассматривалась пространственно однородная система с периодическими граничными условиями. Для статистического усреднения использовался метод, описанный в [3]. Изначально плазма выводилась на равновесие и рассчитывалась достаточно длинная равновесная МД траектория с $T_e = T_i$. Это необходимо для получения набора из 50-400 начальных состояний, в которых пространственные распределения электронов и ионов различны и статистически независимы. Затем в каждом из таких состояний ионы останавливались, а модули скорости всех электронов устанавливались равными $v_0 = (3k_B T_0/m_e)$, при том что их направления оставались различными. Начальная температура T_0 выбиралась в диапазоне 10 – 50 эВ. Далее проводилось моделирование релаксации указанного состояния к равновесию. На последнем этапе выполнялось усреднение всех полученных зависимостей физических величин от времени по ансамблю начальных состояний. Полное число частиц в МД ячейке составляло $N = 1000 - 2000$.

На рисунке 3.14 показана релаксация функции распределения электронов по скоростям, которая в начальный момент $t = 0$ имеет вид $f(v) = \delta(v - v_0)$. В момент времени $t = 0.1$ фс функция распределения уже близка по форме к максвелловской, однако наклон ее экспоненциальной части не соответствует средней кинетической энергии электронов. Наконец, при $t = 1$ фс распределение хорошо совпадает с распределением Максвелла в данном диапазоне скоростей. Это время и можно считать характерным временем релаксации электронной функции распределения.

В целом расчеты для указанного диапазона начальных температур показали, что релаксация функции распределения для электронов происходит на временах не превышающих 1 фс. Например, для $T_0 = 25$ эВ это время составляет 0.25 фс. Поскольку эти времена на порядок величины меньше, чем характерное время релаксации и рентгеновского излучения возбужденных ионов, имеющих вакансию в К-оболочке, то можно считать, что релаксация ионов происходит в окружении термализованных электронов плазмы, за исключением так называемых горячих

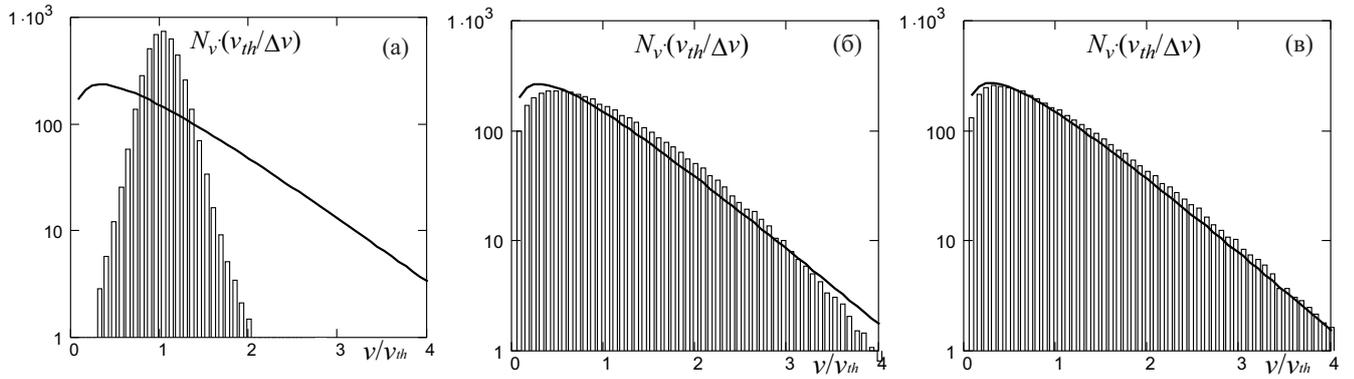


Рис. 3.14. Распределение электронов по скоростям в последовательные моменты времени: (а) $t = 0.01$ фс, (б) $t = 0.1$ фс, (в) $t = 1$ фс. Скорости нормированы на тепловую скорость v_0 для $T_0 = 50$ эВ. Гистограмма — текущее распределение, кривая — распределение Максвелла для температуры $T = 3K/(2kB)$, где K — средняя кинетическая энергия электронов в данный момент времени.

или быстрых электронов.

Экспериментальные данные показывают наличие в системе некоторого количества горячих электронов со средней кинетической энергией, соответствующей $T_e = 3$ кэВ. Моделирование показало, что характерное время их термализации составляет $t \approx 30$ фс (рисунок 3.15). Концентрация этих электронов составляла порядка $0.001n_e$, поэтому, как показали расчет, они практически не оказывали влияния на температуру основной части плазмы (температура плазмы показана на рисунке 3.15 пунктирной линией). Тем не менее, эти электроны учитывались в кинетической модели релаксации ионов, описанной ниже.

3.3.6. Рекомбинация электронов и плавление ионной решетки

Рекомбинацию электронов, вообще говоря, нельзя изучать в рамках классической молекулярной динамики. Однако, время рекомбинации можно оценить, если рассмотреть образование связанных состояний электронов и ионов, соответствующих высоколежащим квазиклассические атомным уровням. Для этого из системы сначала искусственно удаляются все связанные пары электронов и ионов, а затем наблюдается динамика их образования [426,427]. Для исследуемой плазмы такая оценка дает характерное время рекомбинации $t = 100$ фс.

Время разлета плазмы определяется динамикой ионов, которые в начальный момент имеют достаточно низкую температуру ($T_i \ll T_e$), а затем разогреваются

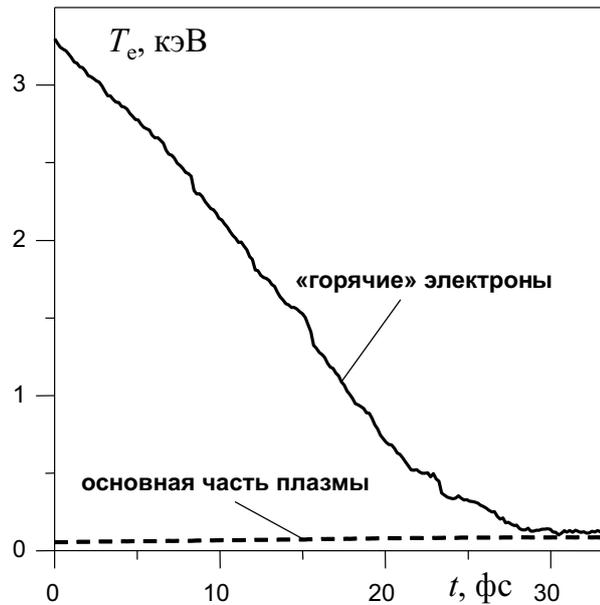


Рис. 3.15. Термализация “горячих” электронов, образованных при ионизации среды: сплошная линия — зависимость мгновенной температуры горячих электронов от времени, пунктирная линия — средняя температура окружающей их плазмы.

за счет двух одновременно идущих процессов: преобразования кулоновской энергии взаимодействия в кинетическую и электрон–ионной релаксации. В частности, важным представляется вопрос о том, как быстро происходит плавление ионной решетки после ионизации.

В проведенных МД расчетах ионы считались изначально неподвижными $T_i(0) = 0$ и находящимися в узлах кубической кристаллической решетки. Для того, чтобы уменьшить время расчета, было выбрано модельное соотношение масс ионов и электронов, равное $m_i/m_e = 100$. В [389] показано, что динамика электронов не зависит от данного отношения при $m_i/m_e \geq 100$, а характерные времена релаксации ионов реальной массы m_i^* получить домножением на множитель $(m_i^*/m_i)^{1/2}$.

Для определения времени существования кристаллической решетки рассчитывалась зависимости от времени для параметра Линдемана $\delta_L = \sqrt{\langle \Delta r^2 \rangle} / a$, где Δr — смещение иона относительно положения равновесия. Указанное на рисунке 3.16 время соответствует ионам $m_i/m_e = 51573$. Излом кривой при $t = 1.5$ пс указывает на плавление ионной решетки. Это время значительно превышает как время электронной релаксации, так и время высвечивания рентгеновских спектральных линий, поэтому динамикой ионов в данной задаче можно пренебречь.

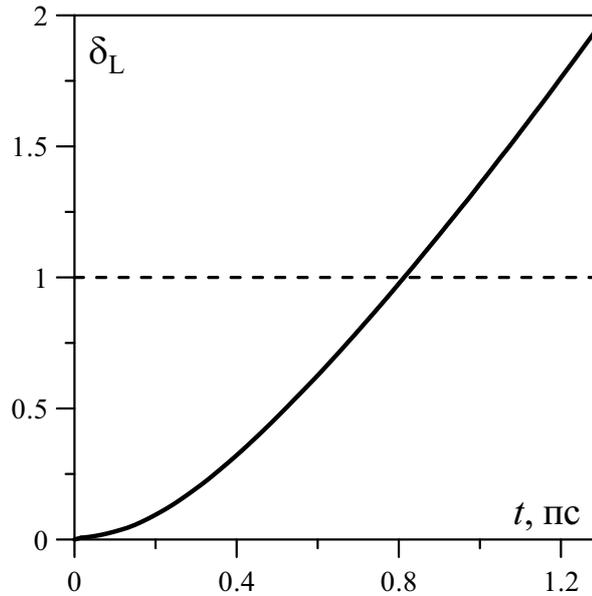


Рис. 3.16. Зависимость параметра Линдемана от времени при плавлении кристаллической решетки кремния (МД расчет).

3.3.7. Релаксация возбужденных состояний ионов

Эволюция возбужденного состояния ионом может быть описана системой зависящих от времени кинетических уравнений [543]

$$\frac{dN_k^Z}{dt} = \sum_{m, Z'} K_{km}^{ZZ'} N_m^{Z'}, \quad (3.8)$$

где $N_k^Z(t)$ — населенность k -того состояния в ионе со спектроскопическим символом Z , $K_{km}^{ZZ'}$ — кинетическая матрица, недиагональные элементы которой дают вероятности перехода $(m, Z') \rightarrow (k, Z)$ в результате всех элементарных процессов, а диагональные со знаком минус равны суммарной вероятности распада состояния (k, Z) . Система уравнений (3.8) решалась как для основных, так и низколежащих возбужденных состояний. В кинетической матрице учитывались процессы ионизации электронным ударом, тройной рекомбинации, фоторекомбинации, радиационного распада, автоионизации и диэлектронного захвата, константы для которых указаны в [543]. Начальные значения $N_k^Z(t)$ определяются известными из литературы сечениями многократной ионизации ионов.

Предварительные оценки показывают, что скорость процессов рекомбинации составляет несколько десятков фемтосекунд. Согласно указанным выше резуль-

татам МД моделирования установление двойного электрического слоя и термализация основных электронов плазмы происходит гораздо быстрее (порядка 1 фс), а рекомбинация электронов и плавление ионной решетки, напротив, имеют существенно большие характерные времена (100 фс и 1 пс, соответственно). Таким образом, при расчете кинетики возбуждения ионов можно считать, что температура и плотность плазмы не меняются.

Решение системы уравнений (3.8) показывает, что время полной релаксации автоионизационных состояний ионов на стационарные значения составляет порядка 100 фс, однако релаксация наиболее обильных ионов происходит за времена порядка 10 – 20 фс, после чего их населенности становятся относительно малыми. Таким образом, основной вклад в рентгеновское излучение плазмы будет определяться временами $t \leq 10 - 20$ фс, что подтверждает правильность сделанных выше предположений. На рисунке 3.17 показаны примеры теоретического расчета интенсивности спектральных линий без учета плазменных процессов (атомная модель) и с учетом влияния электрон–ионных столкновений согласно приведенным выше оценкам (плазменная модель). Сравнение с экспериментальными данными [258, 259] показывает, что плазменная модель существенно лучше описывает результаты измерений. Расчет кинетики возбуждения ионов и интенсивности спектральных линий выполнен Скобелевым И.Ю. и Фаеновым А.Я.

3.4. Выводы к третьей главе

Метод классической МД был применен для анализа ряда неравновесных систем, представляющих собой пространственно неоднородную неидеальную электрон–ионную плазму. 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, а также времени его установления. Было показано, что время установления равновесия составляет порядка 1 фс, ширина слоя имеет порядок дебаевского радиуса, а эффекты неидеальности здесь невелики.

Следующей из рассмотренных систем была плазма вблизи поверхности металла, возникающая в условиях формирования униполярной вакуумной дуги. Эта

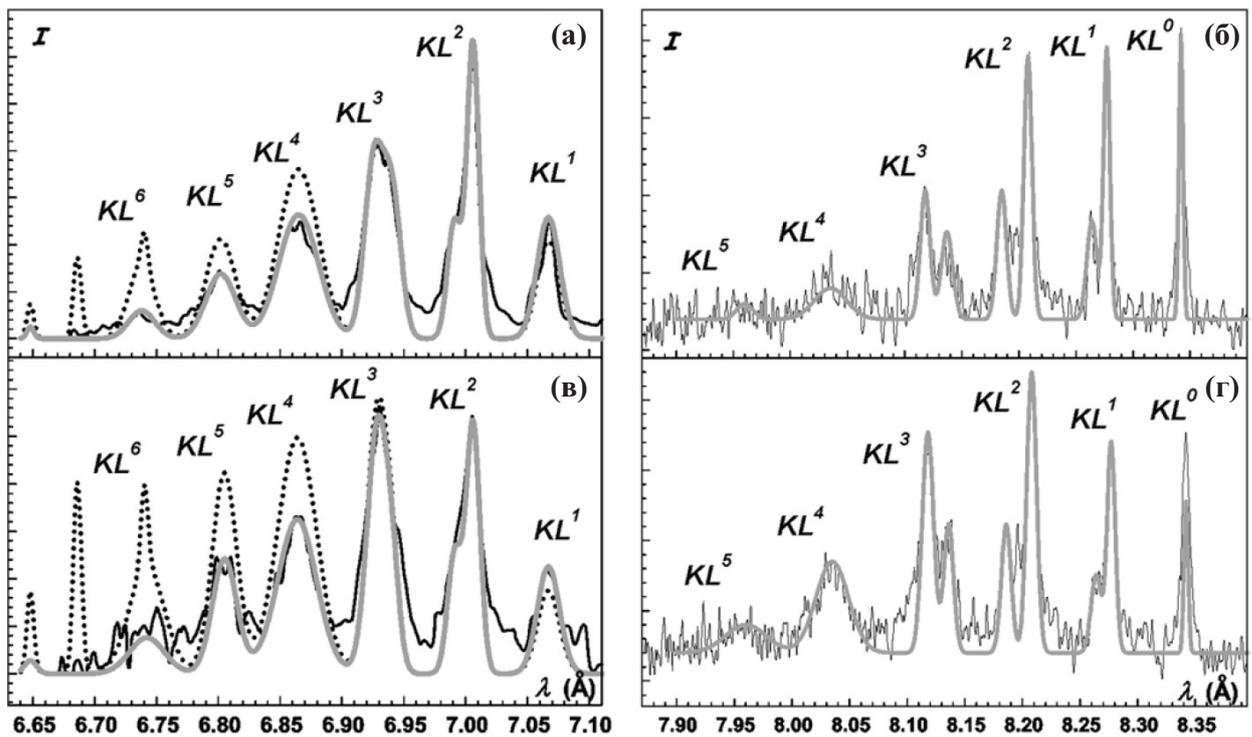


Рис. 3.17. Рентгеновские спектры (относительная интенсивность излучения) многозарядных ионов кремния (а), (в) и алюминия (б), (г) после их возбуждения одиночным тяжелым ионом с энергией 11 МэВ/а.е.м. (а), (б) и 3 МэВ/а.е.м. (в), (г): сплошные черные линии — результаты измерений [258, 259], пунктир — расчеты без учета окружающей ионы плазмы (атомная модель), серые сплошные линии — расчеты с учетом плазмы (плазменная модель).

задача имеет важное прикладное значение для оценки степени повреждения волноводов микроволновых устройств, использующихся для ввода энергии в ускорительной технике. В результате проведенного моделирования было определено, что характерное время установления равновесного распределения электронов на границе плазмы составляет порядка 100 фс. На распределении заряда вблизи поверхности металла был 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 этих зависимостей предложены простые полуэмпирические формулы. Полученные результаты согласуются с пространственным масштабом повреждений поверхностей, наблюдаемых в экспериментах. Данные повреждения в дальнейшем могут являться причиной развития электрического пробоя в микроволновых устройствах.

Наконец, в третьем случае рассматривалась неидеальная плазма в треке оди-

ночного многозарядного иона в конденсированной мишени. Эта задача также 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, получаемых в результате релаксации возбужденных ионов мишени, имеющих вакансию в К-оболочке. Для правильной интерпретации результатов этих экспериментов необходимо иметь информацию о концентрации электронов на этапе высвечивания рентгеновских спектральных линий (10-100 фс после ионизации). В результате МД моделирования в настоящей работе показано, что к указанному моменту времени успевает установиться максвелловское распределение по скоростям для основной части электронов плазмы, а термализация части “горячей” электронов происходит примерно на тех же временах. Кроме того, показано, что концентрация электронов составляет не менее 85 % от начальной, а плавление ионной решетки и рекомбинация электронов происходят на существенно больших временах. Эти результаты позволили построить корректную модель излучения возбужденных ионов мишени, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными.

В целом полученные результаты показывают общий для всех случаев характер релаксации и установления двойного электронного слоя на границе неидеальной плазмы с различной геометрией. Рассмотренная здесь методика моделирования релаксационных процессов и систем с открытой границей используется далее при моделировании кластерной наноплазмы в главе 4.

Результаты данной главы опубликованы в [4–6, 8, 11, 13, 17].

Глава 4

Динамика электронов в кластерной наноплазме

4.1. Метод исследования кластерной наноплазмы

Кластером принято называть компактную группу связанных друг с другом атомов или молекул. Газ, состоящий из кластеров, может рассматриваться как новый тип вещества, поскольку свойства такой среды заметно отличаются от свойств газа, жидкости или твердого тела, образованных теми же атомами или молекулами [213–215]. Зависимость свойств среды от размера кластера наиболее выражена для кластеров нанометрового размера (нанокластеров), содержащих от нескольких десятков до сотен тысяч атомов.

Облучение наноразмерного кластера лазерным импульсом фемто- или пикосекундной длительности приводит к быстрой ионизации атомов и последующему разлету образовавшихся ионов вследствие кулоновской неустойчивости и электростатического отталкивания. Это явление получило название “кулоновского взрыва”. При этом следует различать внутреннюю и внешнюю ионизацию кластера. Оба этих процесса показаны на рисунке 4.1, где предполагается, что изначально электроны находятся в связанном состоянии на соответствующих атомных уровнях. Если энергия, получаемая электроном от лазерного импульса, недостаточна для его удаления из кластера, т.е. внешней ионизации, то электрон может быть удержан электростатическим полем, образованным всеми ионами кластера. В этом случае следует говорить о внутренней ионизации. Электроны, полученные в результате внутренней ионизации и находящиеся в поле ионов кластера, образуют кластерную плазму или наноплазму в случае кластеров нанометрового размера.

В литературе чаще всего рассматриваются кластеры из инертных газов, полученные при криогенных температурах, металлические кластеры и кластеры, имеющие несколько оболочек из различных веществ. Для металлических кластеров схема на рисунке 4.1 будет несколько иной, так как внутренняя ионизация в первую очередь происходит не из атомных уровней отдельных атомов, а из зоны проводимости. Однако, для исследования кластерной плазмы это не имеет прин-

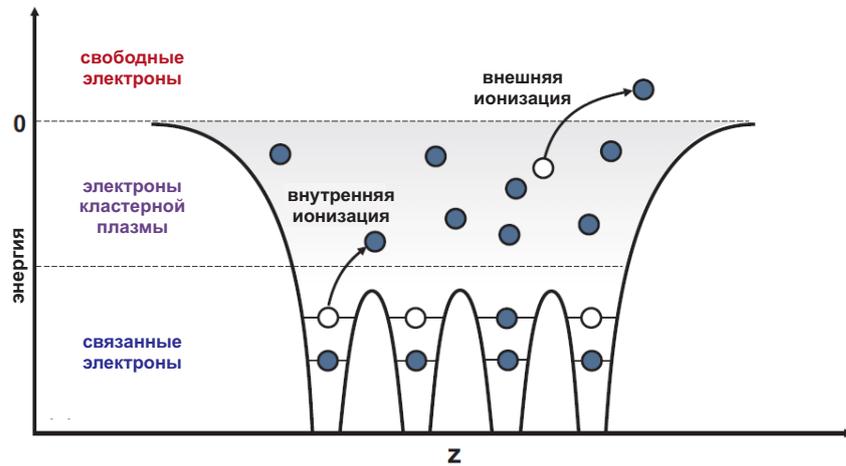


Рис. 4.1. Внутренняя и внешняя ионизация электронов в кластере из атомов инертного газа под действием лазерного импульса [228].

ципиального значения. Разлет кластеров после ионизации определяется в большей степени зарядом и массой ионов, а состояние электронной подсистемы — температурой электронов, зарядом и концентрацией ионов, а не типом химического элемента. Исходя из этого, в данной работе мы будем приводить примеры ионизованных кластеров из различных химических элементов, не делая между ними существенных различий.

Динамика кластера, как показано на рисунке 4.2, существенным образом зависит от интенсивности ионизирующего импульса. При релятивистских интенсивностях (рисунок 4.2б) к окончанию действия импульса кластер претерпевает практически полную внешнюю ионизацию, и наноплазма не формируется. При интенсивностях $I = 10^{15}$ Вт/см² и менее (рисунок 4.2а) часть электронов удерживается в кластере вместе с ионами различного заряда. При интенсивностях $I = 10^{12} - 10^{14}$ Вт/см² сформировавшаяся наноплазма может иметь заметную степень неидеальности [412,413]. При этом спектр квантовых состояний электронов с температурой 1 эВ и более можно считать непрерывным, поэтому динамика такой наноплазмы хорошо описывается законами классической механики.

Как уже обсуждалось в разделе 1.1.7, кластерная плазма имеет много практических приложений. Кроме того, ее изучение может дать новую информацию для развития теории неидеальной плазмы и быстропротекающих процессов. В цикле работ [239–243] для исследования состояния наноплазмы после ионизации была применена методика “pump-probe”, в которой исходный фемтосекундный лазер-

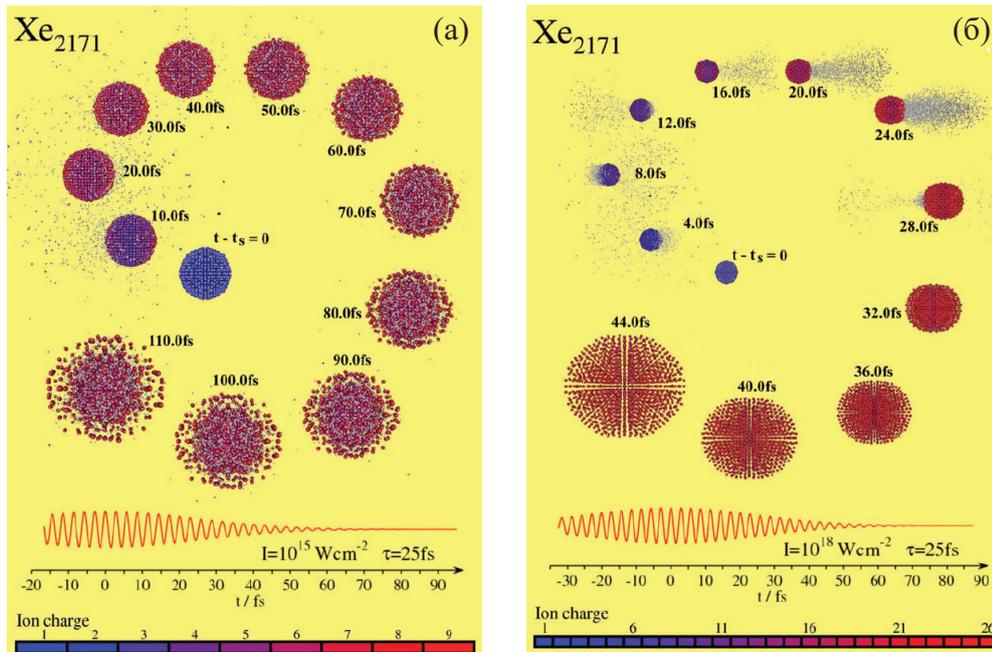


Рис. 4.2. Эволюция кластера ксенона после ионизации лазерными импульсами различной интенсивности: (а) $I = 10^{15}$ Вт/см², (б) $I = 10^{18}$ Вт/см². Цветные кружки — ионы различной степени ионизации (шкала цветов приведена снизу), серые точки — электроны. На графиках внизу показаны профили лазерных импульсов [423].

ный импульс разделялся на две части. Первая часть использовалась для ионизации кластера, а вторая приходила с контролируемой задержкой и взаимодействовала уже с образовавшейся наноплазмой. Результаты измерений показали резкий рост выхода заряженных частиц при задержке между импульсами 0.5 – 2 пс, что связывается с резонансным поглощением второго импульса на коллективных модах электронных колебаний.

Эффект резонансного поглощения может быть использован для повышения эффективности генерации рентгеновского излучения, высокоэнергетичных ионов и др., а также с диагностической целью, поэтому исследование колебаний электронов в наноплазме представляет актуальную задачу. Сопоставление экспериментальных данных с результатами компьютерного моделирования может также использоваться для верификации и уточнения модели динамической проводимости неидеальной плазмы, рассмотренной в главе 2. Описанные в данной главе результаты позволяют понять процесс установления локального равновесия в электронной подсистеме наноплазмы, найти частоты и декременты затухания основных мод колебаний электронов в зависимости от размера кластера.

4.1.1. Модель наноплазмы и обоснование выбора метода

Для определенности далее рассматривается неидеальная наноплазма, образованная в результате полной однократной ионизации кластеров натрия с числом атомов $50 - 10^5$. Такая плазма может быть получена воздействием лазерного импульса интенсивностью $5 \cdot 10^{11} - 10^{13}$ Вт/см², длиной волны $\lambda = 436.6$ нм и длительностью $50 - 100$ фс. Температура электронов после ионизации в этом случае составляет нескольких электрон-вольт, потому плазма является неидеальной с параметром неидеальности $\Gamma \sim 1$.

Данная модель выбрана в первую очередь для сопоставления с прежними теоретическими работами, выполненными с помощью решения уравнения Власова [544, 545] и метода классической МД [313, 417]. Экспериментально ионизованные кластеры натрия изучались, например, в [238]. Как было отмечено выше, полученные результаты имеют достаточно общий характер и, за некоторым исключением, не зависят от выбора вещества мишени.

Теоретическое исследование динамики ионизованных кластеров может быть выполнено с привлечением указанных выше методов численного решения уравнения Власова, классической МД, а также квантовой молекулярной динамики, в том числе с зависящим от времени состоянием электронов (КМД-ЗВ), см. разделы 1.3.2 и 1.3.4. Поскольку нас не будут интересовать процессы первичной ионизации атомов кластера и другие квантово-механические явления, то использование тяжелого с вычислительной точки зрения метода КМД-ЗВ здесь является явно избыточным. С другой стороны, при решении уравнения Власова, как правило, используются сильно приближенные модели взаимодействия частиц, не вполне подходящие для описания эффектов неидеальности. Таким образом, выбор классической МД в качестве метода моделирования, является оптимальным.

В МД моделировании участвуют электроны и однократно заряженные ионы. Поскольку для атома натрия потенциал ионизации первого электрона существенно меньше энергии ионизации последующих электронов, для умеренных интенсивностей световой волны такая модель выглядит вполне оправданной. Взаимодействие между электронами и ионами описывается псевдопотенциалом (1.20), где параметр $\lambda_{ei} = 0.318$ нм выбран таким образом, чтобы энергия взаимодействия

в нуле совпадала с потенциалом ионизации натрия $V_{ei}(0) = -5.1$ эВ. Ион–ионное взаимодействие считалось кулоновским (1.13), для электрон–электронного взаимодействия выбирался либо потенциал (1.20) с тем же значением параметра $\lambda_{ee} = \lambda_{ei}$, либо кулоновский потенциал. Как показали расчеты, разница между этими двумя вариантами не очень велика. Относительная масса иона составляла $m_i/m_e = 41910$. Шаг интегрирования, как и в описанных ранее расчетах, имел порядок 10^{-18} с, что обеспечивало сохранение полной энергии не хуже 1 % при длине траектории до $5 \cdot 10^7$ шагов.

4.1.2. Ионизация и расширение кластера

Кластер натрия состоит из одного атома в центре и одной или нескольких оболочек с икосаэдрической симметрией (рисунок 4.3). В численной модели в начальный момент времени координаты каждого электрона совпадали с координатами одного из ионов, а скорости были равны нулю.

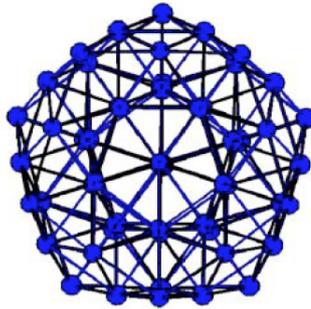


Рис. 4.3. Икосаэдрическая структура кластера Na_{55} [546].

В отличие от расчетов, описанных в предыдущих главах, для данной системы не применялись никакие граничные условия. Ионизация кластера моделировалась путем воздействия на систему зарядов электрического поля лазерного импульса с гауссовским временным профилем. Поскольку длина волны излучения значительно превышает размер кластера, поле лазерной волны внутри кластера внутри ячейки можно считать однородным. Магнитное поле не учитывалось вследствие малой интенсивности импульса.

Рассмотрим результаты моделирования для ионизирующего импульса интенсивностью $5 \cdot 10^{11}$ Вт/см² и длительностью 50 фс. В результате поглощения энергии поля, часть электронов вылетает из кластера, а оставшаяся часть образу-

ет наноплазму. После ионизации под действием кулоновских сил отталкивания ионизованный кластер начинает расширяться. На рисунке 4.4 показано изменение среднего размера ионного ядра кластера $r_{\text{rms}} = \sqrt{5/3 \sum_i \langle r_i^2 \rangle}$ от времени, где красным цветом отмечен период воздействия лазерного импульса (здесь и далее время отсчитывается от момента окончания лазерного импульса). Скорости ионов при временах $t \lesssim 1$ пс являются довольно малыми и на взаимодействие с электронами существенного влияния не оказывают. В то же время изменение плотности плазмы за счет расширения кластера, как будет показано ниже, существенно меняет свойства электронной подсистемы.

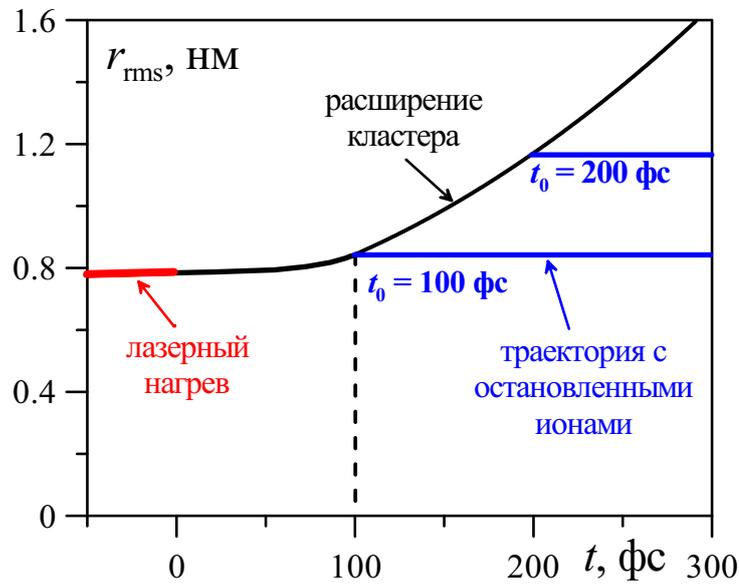


Рис. 4.4. Зависимость размера кластера Na_{55} от времени с отмеченными этапами моделирования.

Как было указано ранее (см. рисунок 4.1), в ионизованном кластере можно условно выделить три типа электронов: связанные с ионами, локализованные внутри кластера в результате внутренней ионизации и вылетевшие из кластера на значительное расстояние в результате внешней ионизации. Отклик плазмы на второй лазерный импульс в схеме “pump-probe” будет определяться первыми двумя типами электронов, поэтому для практических приложений важно знать состояние этих компонент в различные моменты времени.

На рисунке 4.5 показано распределение электронов по значениям полной энергии E_{tot} . Небольшая фракция частиц, имеющих положительную энергию $E_{\text{tot}} > 0$ и удалившихся от кластера на расстояние нескольких r_{rms} относится к электронам, подвергшимся внешней ионизации. В МД моделировании такие элек-

троны исключаются из дальнейших расчетов. Большинство же электронов, как видно из рисунка, имеют отрицательную энергию связи и близкое к больцмановскому распределение по энергии. Эти электроны и составляют основу наноплазмы. Принципиальных различий между связанными и локализованными электронами в МД модели нет, так как рекомбинация и ионизация для квазиклассических связанных состояний в неидеальной плазме носит флуктуационный характер [426]. Разница между количеством ионов и количеством оставшихся в наноплазме электронов определяет заряд кластера: $Z(t) = N_i - N_e(t)$ (здесь и далее в данной главе под зарядом кластера мы будем понимать его фактический заряд, отнесенный к заряду электрона e).

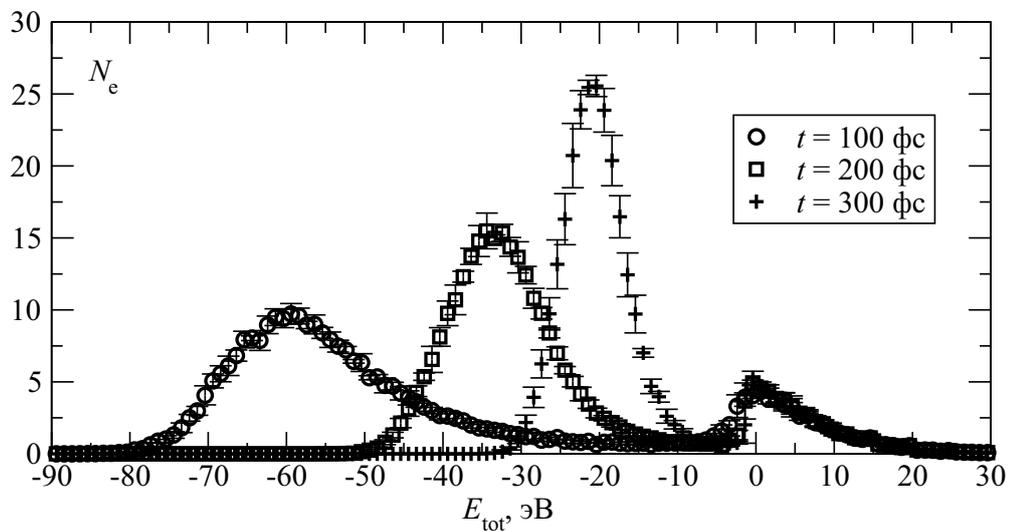


Рис. 4.5. Распределение электронов по энергиям в различные моменты времени t после окончания воздействия импульса на кластер Na_{55} (значения t указаны на графике). Показанные погрешности определяются статистическим усреднением.

4.2. Свойства кластерной наноплазмы в зависимости от температуры электронов, плотности и размера кластера

4.2.1. Исследование квазиравновесной кластерной наноплазмы

Для исследования динамики электронов в наноплазме использовалось два подхода. Первый из них был основан на МД моделировании неравновесных процессов, описанном в предыдущей главе. В этом случае проводилась серия МД расчетов для ансамбля различных начальных состояний, которые отличаются микро-

скопически (небольшой сдвиг электронов из состояния равновесия), но идентичны макроскопически. Результат моделирования неравновесного процесса, которым является разлет кластера, усреднялся по данному ансамблю. Этим методом была рассчитана, например, релаксация функции распределения электронов по импульсам (рисунок 4.6). Как видно из рисунка, при $t \geq 100$ фс распределение близко к равновесному $f_e(p) = 4\pi(\beta/(2\pi m_e))^{3/2} p^2 \exp(-\beta p^2/(2m_e))$.

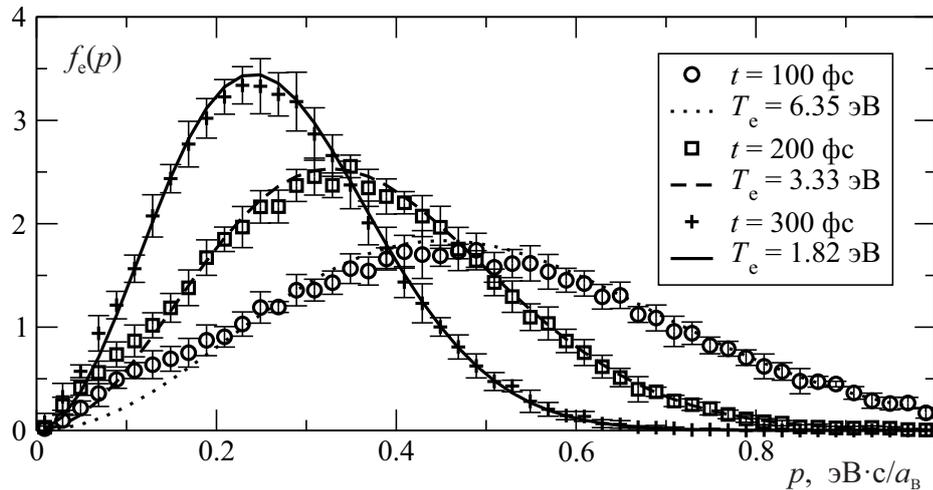


Рис. 4.6. Распределение электронов наноплазмы для Na_{55} по импульсам: точки — данные МД моделирования в указанные на графике моменты времени t после окончания воздействия лазерного поля, линии — распределения Максвелла при указанных температурах T_e . Показанные погрешности определяются статистическим усреднением.

Второй подход заключался в том, что для исследования электронной подсистемы, ионы останавливались в определенный момент времени t_0 , после чего моделировалась динамика электронов при фиксированных положениях ионов (горизонтальные линии на рисунке 4.4). Другими словами, мы рассматриваем своего рода моментальный снимок наноплазмы в определенный момент расширения кластера. Такая методика позволяет, во-первых, отдельно рассмотреть релаксацию электронной подсистемы, а, во-вторых, использовать усреднение по времени на полученной квазиравновесной МД траектории, что в данном случае эффективнее, чем усреднение по ансамблю, так как длина этой траектории фактически не ограничена. Усреднение по ансамблю в этом случае также используется, но лишь для положений ионов на момент их остановки.

На рисунке 4.7 показан пример изменения мгновенной температуры наноплазмы $T_e = 2K_e/(3N_e k_B)$, где K_e — кинетическая энергия электронов, а также числа остающихся в ней электронов N_e после остановки ионов в момент времени

$t_0 = 100$ фс на одной из траекторий. Наиболее длительным процессом релаксации является установление полного заряда кластера $Z_{\text{fin}} = Z(t \gg t_0) = N_i - N_e$. Скачки на зависимостях T_e и N_e от времени показывают моменты внешней ионизации отдельных электронов.

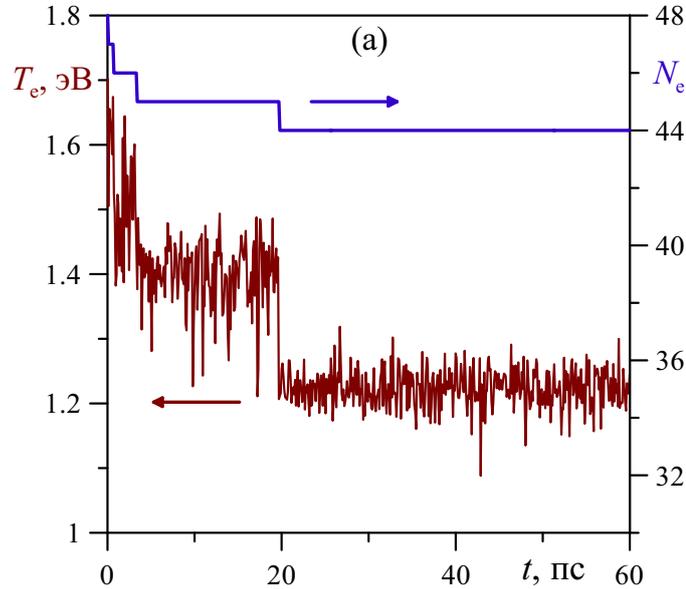


Рис. 4.7. Установление равновесия в электронной подсистеме кластера Na_{55} при неподвижных ионах: сплошная кривая (левая ось) — средняя кинетическая энергия электронов, пунктир (правая ось) — количество оставшихся электронов в кластере.

Процесс уменьшения числа электронов со временем в результате эмиссии носит экспоненциальный характер. Если рассматривать электроны как сплошную среду, то этот процесс, вообще говоря, не завершается никогда. С учетом конечного числа электронов эмиссия становится полностью невозможной, когда суммарная кинетическая энергия всех электронов становится меньше потенциала кластера. На практике в МД траектории с остановленными ионами еще до выполнения этого критерия можно выделить достаточно продолжительный участок, на котором вероятность ионизации очередного электрона становится очень мала, поэтому число частиц в кластере и их средняя кинетическая энергия остаются постоянными. Именно такие квазиравновесные участки используются далее для исследования свойств наноплазмы.

Установившееся распределение потенциальной и кинетической энергии пробного электрона внутри кластера показано на рисунке 4.8. Как видно из рисунка 4.8а кулоновский потенциал ионов экранируется распределением электронов в

плазме, снижая тем самым энергию ионизации, причем экранирование происходит в основном на границе кластера, а потенциал его внутренней области близок к константе (кривая 3). Распределение кинетической энергии электронов внутри кластера на квазиравновесном участке (рисунок 4.8б) также близко к однородному, а функция распределения частиц по энергиям хорошо совпадает с максвелловской, в отличие от рисунка 4.6, где для малых времен между рассчитанным и теоретическим распределениям имеются заметные отличия. Время установления равновесных распределений по энергиям не превышает 10 фс, что согласуется с результатами, описанными в предыдущей главе.

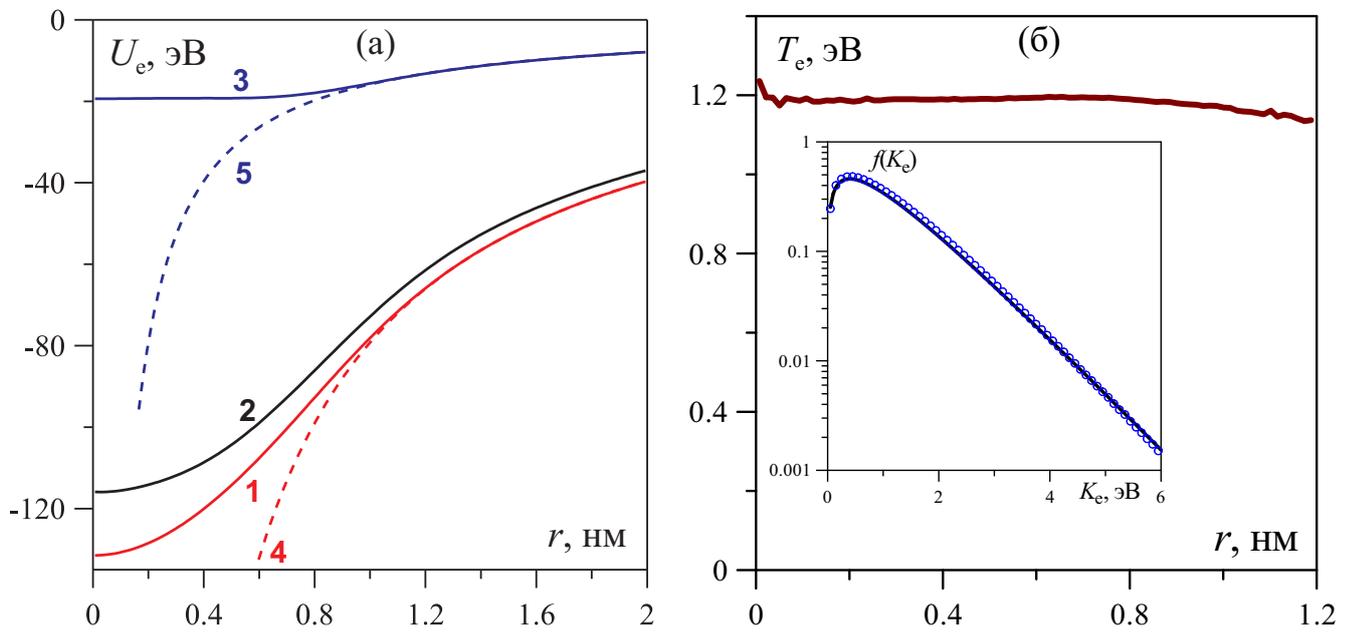


Рис. 4.8. Радиальное распределение потенциальной (а) и кинетической (б) энергии электронов в кластере Na_{55} , полученное усреднением по квазиравновесному участку траектории $t > 20$ пс. Потенциальная энергия электрона на рисунке (а) указана с учетом взаимодействия: 1 — со всеми ионами, 2 — со всеми ионами и электронами ядра кластера ($r < 6a_B$), 3 — со всеми ионами и оставшимися электронами (потенциал кластера). На рисунке показан также кулоновский потенциал для полного заряда всех ионов (кривая 4) и фактического заряда кластера $Z = 11$ (кривая 5). Кинетическая энергия на рисунке (б) представлена в единицах температуры, на вставке показано распределение электронов по значениям кинетической энергии: кружки — результаты МД, кривая — распределение Максвелла.

Параметры квазиравновесной наноплазмы, полученные при различном времени остановки ионов, для кластеров, содержащих 55, 147 и 309 ионов, представлены в таблицах 4.1 – 4.4. Дробное значение Z_{fin} означает, что в интервал усреднения попало несколько моментов эмиссии электронов. Из таблиц видно, что степень неидеальности плазмы во всех случаях довольно высока. Частоты ω_1 ,

ω_2 , ω_{sp} будут описаны в разделе 4.3.

4.2.2. Заряд кластера и профиль электронной плотности

В примерах моделирования, приведенных в предыдущем разделе, температура электронов и концентрация ионов в наноплазме определялись параметрами лазерного импульса, размером кластера и временем остановки ионов. Однако, для исследования зависимости свойств плазмы от одного из этих параметров (например, температуры), удобно воспользоваться термостатом, который позволяет задать требуемую температуру электронов на квазиравновесном участке. При этом термостат можно использовать только для повышения температуры, так как в ином случае кластер потеряет избыточное число электронов на этапе более сильного нагрева, и при охлаждении наноплазма будет иметь завышенное значение Z . После достижения необходимой температуры термостат может быть отключен с последующим расчетом равновесной МД траектории.

Моделирование начального участка разлета плазмы в таком подходе фактически используется лишь для получения реалистичных конфигураций ионов, но не состояния электронной подсистемы. Таким образом, точность модели ионизации электронов не является более несущественной, так как анализируется уже сформировавшаяся тем или иным образом плазма. Для создания же реалистичной модели динамики кластера в целом необходимо использовать более точные квантово-механические методы моделирования ионизации (КМД-ЗВ, МДВП), а затем использовать полученные в них данные о температуре электронной подсистемы в качестве начальных параметров для описываемого здесь МД моделирования или созданных на его основе интерполяционных формул.

Длина равновесных участков МД траектории в приведенных ниже расчетах составляла от 0.9 пс до 0.5 нс. Усреднение проводилось по 4-6 конфигурациям ионов. Для $N_i < 1000$ различные конфигурации ионов получались путем смещения их относительно узлов икосаэдрической решетки $x' = x + \xi a_i(1 - b)/2$, где ξ — случайная величина, однородно распределенная в интервале $[0; 1]$, a_i — среднее расстояние между ионами в невозмущенном кристалле, $b = 0.7$ — амплитуда смещения. Распределение ионов в кластере при $N_i \geq 1000$ выбиралось однород-

Таблица 4.1. Параметры наноплазмы для кластера Na_{55} в зависимости от времени остановки ионов t_0 : r_{rms} — средний размер кластера, Z_{fin} — равновесный заряд кластера, n_i и n_e — средняя концентрация ионов и электронов, T_e — температура плазмы, Γ — параметр неидеальности, ω_1 и ω_2 — частоты первого и второго резонансов по результатам МД, ω_{sp} — расчетная частота первого резонанса, ω_{Mie} — частота Ми, ω_p — ленгмюровская частота.

№	t_0 , фс	r_{rms} , нм	Z_{fin}	n_i , 10^{21}см^{-3}	n_e , 10^{21}см^{-3}	T_e , эВ	Γ	ω_1 , фс $^{-1}$	ω_{sp} , фс $^{-1}$	ω_{Mie} , фс $^{-1}$	ω_2 , фс $^{-1}$	ω_p , фс $^{-1}$
1	100	0.848	11	21.497	17.198	1.23	4.89	3.803	3.810	4.776	6.157	7.398
2	150	0.979	11	13.977	11.181	0.94	5.51	3.104	3.115	3.851	5.271	5.965
3	200	1.171	10	8.167	6.682	0.77	5.72	2.404	2.429	2.943	4.363	4.612
4	250	1.398	9	4.804	4.018	0.72	5.11	1.903	1.977	2.258	—	3.576
5	300	1.641	9	2.970	2.484	0.59	5.34	1.635	1.669	1.775	—	2.812

Таблица 4.2. Параметры наноплазмы для кластера Na_{147} в зависимости от времени остановки ионов. Значения параметров указаны в таблице 4.1.

№	t_0 , фс	r_{rms} , нм	Z_{fin}	n_i , 10^{21}см^{-3}	n_e , 10^{21}см^{-3}	T_e , эВ	Γ	ω_1 , фс $^{-1}$	ω_{sp} , фс $^{-1}$	ω_{Mie} , фс $^{-1}$	ω_2 , фс $^{-1}$	ω_p , фс $^{-1}$
1	100	1.201	40	20.24	14.73	2.67	2.13	4.024	4.026	4.634	6.965	6.847
2	150	1.497	37	10.47	7.835	2.08	2.22	2.792	3.002	3.333	5.112	4.994
3	200	1.906	34	5.069	3.896	1.64	2.23	1.92	2.322	2.319	3.641	3.521
4	250	2.373	31.4	2.626	2.065	1.24	2.38	1.3933	1.778	1.669	2.696	2.564
5	300	2.870	29.7	1.484	1.184	1.01	2.44	1.0587	1.388	1.255	—	1.941

Таблица 4.3. Параметры наноплазмы для кластера Na_{309} в зависимости от времени остановки ионов. Значения параметров указаны в таблице 4.1.

№	t_0 , фс	r_{rms} , нм	Z_{fin}	n_i , 10^{21}см^{-3}	n_e , 10^{21}см^{-3}	T_e , эВ	Γ	ω_1 , фс $^{-1}$	ω_{sp} , фс $^{-1}$	ω_{Mie} , фс $^{-1}$	ω_2 , фс $^{-1}$	ω_p , фс $^{-1}$
1	100	1.497	49.2	21.99	18.49	2.97	2.07	4.120	4.119	4.830	6.800	7.670
2	150	1.718	46.2	14.55	12.37	2.41	2.23	3.100	3.308	3.929	5.380	6.275
3	200	2.037	44.8	8.729	7.464	1.87	2.43	2.310	2.676	3.043	4.130	4.874
4	250	2.415	41.4	5.238	4.537	1.54	2.49	1.750	2.199	2.357	3.220	3.800
5	300	2.828	38.2	3.260	2.857	1.26	2.61	1.350	1.815	1.860	—	3.016

Таблица 4.4. Параметры наноплазмы для кластеров различного размера при степени неидеальности $\Gamma \approx 2$. Значения параметров указаны в таблице 4.1.

№	N_i	t_0 , фс	r_{rms} , нм	Z_{fin}	n_i , 10^{21}см^{-3}	n_e , 10^{21}см^{-3}	T_e , эВ	Γ	ω_1 , фс $^{-1}$	ω_{Mie} , фс $^{-1}$	ω_2 , фс $^{-1}$	ω_p , фс $^{-1}$
1	55	190	1.130	24	9.112	5.136	2.008	1.994	2.85	3.109	5.38	4.043
3	147	180	1.733	38	6.744	5.000	1.990	1.995	2.25	2.675	4.21	3.989
4	309	230	2.258	54.6	6.405	5.273	1.964	2.057	2.01	2.607	3.66	4.097

ным без сохранения икосаэдрической структуры, так как при указанных размерах кластера тип кристаллической решетки не оказывает влияние на результат. Для ускорения расчетов применялись графические ускорители.

Рассмотрим полученные указанным способом равновесные радиальные распределения электронов в кластере при двух различных температурах (рисунок 4.9а). На распределениях виден явный пик концентрации вблизи границы кластера, однако по увеличению N_i он становится меньше, а участок однородного распределения электронов внутри кластера — все более выраженным. Это согласуется с данными о профиле потенциала кластера (рисунок 4.8а). Соответствующая зависимость установившегося заряда кластера Z_{fin} от его размера и температуры электронов показана на рисунке 4.9б. Увеличение температуры приводит к большей зарядке кластера, а зависимость заряда от числа ионов при постоянной температуре аппроксимируется степенной зависимостью $R_i \sim N_i^\alpha$, где $\alpha \approx 0.2$. Более подробно эта зависимость обсуждается в подразделе 4.2.3.

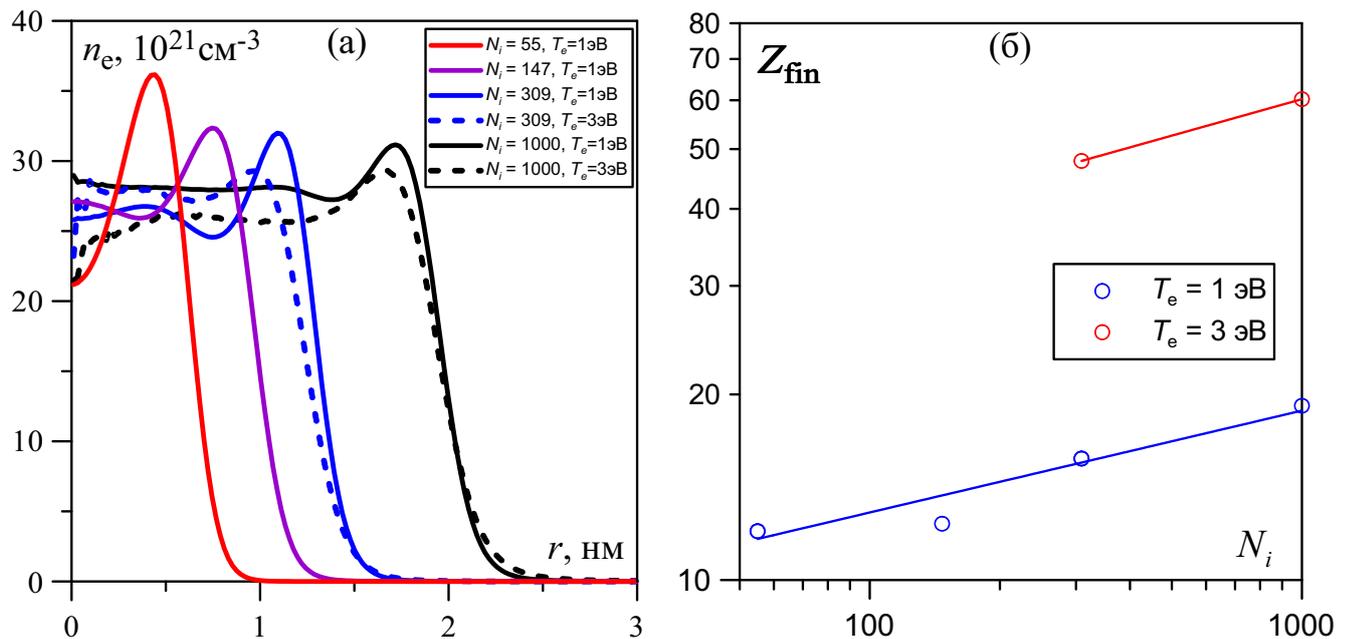


Рис. 4.9. (а) Радиальное распределение концентрации электронов (а) и средний заряд кластера в квазистационарном режиме при различных температурах плазмы T_e и количестве ионов в кластере N_i (значения T_e и N_i указаны на графиках). Линии — степенная аппроксимация.

На рисунке 4.10 показана эволюция профиля электронов при увеличении размеров кластера в более широких пределах изменения N_i , а также сравнение профилей для различного типа электрон-электронного взаимодействия. Из рисунка

видно, что пик концентрации на границе плазмы исчезает в случае кулоновского отталкивания электронов, в то время как остальные характеристики профиля не изменяются. Расхождения данных для разных N_i при малых r связаны со статистическими погрешностями.

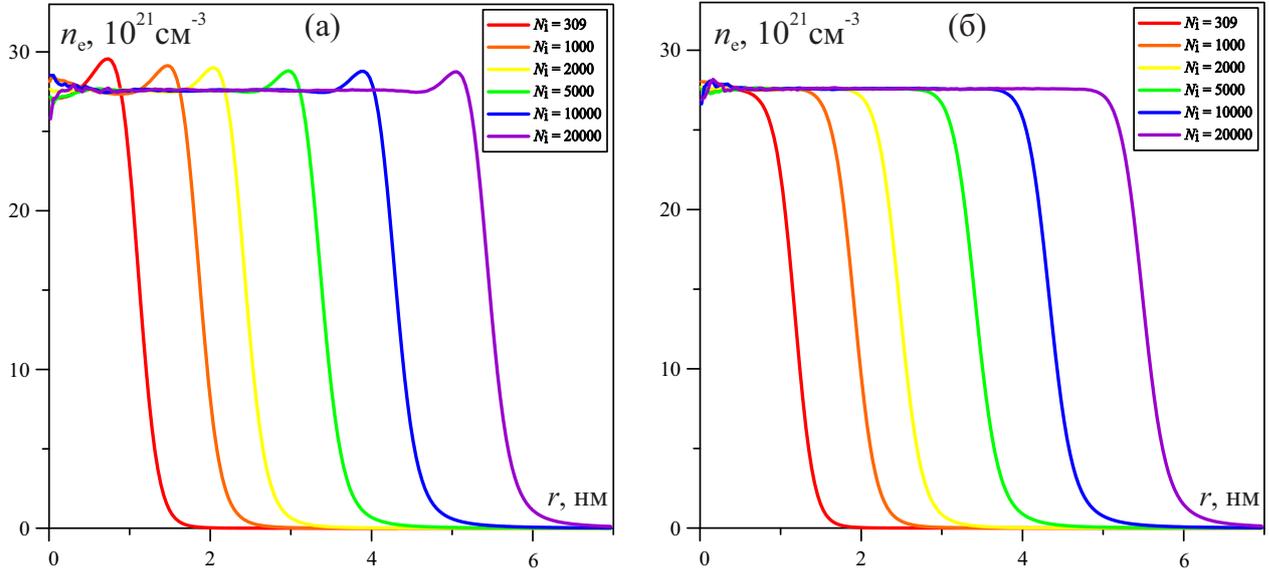


Рис. 4.10. Равновесные радиальные распределения концентрации электронов в кластерной наноплазме при использовании в качестве потенциала электрон-электронного потенциала (а) псевдопотенциала с функцией ошибок (1.20), (б) кулоновского потенциала (1.13). Температура плазмы $T_e = 5$ эВ, концентрация ионов $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Количество ионов в кластере N_i для каждой кривой указано на графике.

4.2.3. Моделирование внешней ионизации электронов

Применим описанный выше метод моделирования квазиравновесной наноплазмы для более детального исследования процесса зарядки кластера в результате внешней ионизации электронов. В том случае, когда на этапе установления заряда кластера применение термостатирования, при эмиссии каждого из электронов для компенсации снижения температуры система получает дополнительную энергию от термостата, размер которой сложно контролировать. Таким образом, процесс зарядки кластера оказывается зависимым от настройки термостата.

Вместо этого для моделирования процесса зарядки кластера можно использовать следующую схему. На начальном этапе вывода наноплазмы на равновесие с помощью термостата, электроны удерживаются в сфере радиуса R_i с помощью дополнительного отражающего потенциала. В этом случае процесс термализации

занимает относительно небольшое время, как и в случае однородной плазмы, описанной в главе 2. После достижения равновесия в момент времени t_{eq} термостат отключается и отражающий потенциал убирается, позволяя электронам покидать кластер. Далее, как было описано в подразделе 4.2.1, моделируется неравновесный процесс эмиссии электронов, однако теперь этот процесс начинается с заранее выбранной температуры плазмы T_0 . При моделировании также выполняется усреднение по начальным состояниям электронов и ионов. Конечное состояние кластера после внешней ионизации определяется по отсутствию изменения заряда кластера на протяжении 1 пс. Как было отмечено выше, равновесное распределение электронов по скоростям устанавливается на временах не более 10 фс, поэтому этот процесс мало влияет на релаксацию заряда кластера.

Зависимость конечной температуры кластера от его размера показана на рисунке 4.11а для двух значений начальной температуры: 2.2 эВ и 3 эВ. Концентрация ионов и начальная концентрация электронов в обоих случаях составляла $n_i = n_{e0} = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, что дает значения параметра неидеальности $\Gamma = 3.17$ и 2.32, соответственно. Рисунок показывает, что часть энергии, уносимой ионизованными электронами, становится меньше по мере увеличения размера кластера, поэтому при $R_i \rightarrow \infty$ температура T_{fin} сравнивается с начальной. При малых размерах кластера потери энергии являются довольно существенными.

С целью определения роли столкновительных процессов расчеты квазиравновесной наноплазмы проводились также для так называемой модели “желе” (jellium model) [409, 410]. В этом случае набор точечных ионов заменялся однородно заряженной сферой радиуса R_i с плотностью заряда $\rho_i = en_i = eN_i(4\pi R_i^3/3)^{-1}$. Зависимость потенциала ионов от радиуса определялась выражением

$$U_{\text{Jel}}(r) = \begin{cases} 4\pi e^2 n_i \left(\frac{r^2}{6} - \frac{R_i^2}{2} \right), & \text{при } r \leq R_i, \\ -\frac{e^2 N_i}{r}, & \text{при } r > R_i. \end{cases} \quad (4.1)$$

Электрон-электронное взаимодействие считалось кулоновским. Полный список используемых в данном разделе моделей взаимодействия приведен в таблице 4.5.

Результаты зарядки кластера для модели “желе” и двух указанных в таб-

Таблица 4.5. Модели взаимодействия частиц, использованные при МД моделировании кластерной наноплазмы.

Название	V_{ii}	V_{ei}	V_{ee}
Jellium	—	U_{Jel} (4.1)	V^{Coul} (1.13)
Erf	V^{Coul}	V^{Erf} (1.20)	$-V^{Erf}$
Coul	V^{Coul}	V^{Erf}	V^{Coul}

лице 4.5 типов электрон-электронного показаны на рисунке 4.11а. Как видно из рисунка, результат моделирования довольно слабо зависит от модели взаимодействия. Это говорит о том, что в данном случае эффекты неидеальности достаточно слабы, поэтому для анализа результатов вполне применимы классические модели, хотя в разделе 4.3 будет показано, что для анализа электронных колебаний в кластере тип взаимодействия частиц имеет более существенное значения.

Теоретический анализ эмиссии электронов из кластера приведен в работах [410, 547], в частности, в [547] предложена система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих зависимость заряда кластера и кинетической энергии электронов от времени. Дополнение этих уравнений моделью расширения кластера дает расширенную систему уравнений, численное решение которой хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными и результатами МД моделирования. В целом рассматриваемая задача близка к задаче термоэмиссии электронов металла, поэтому полученные уравнения имеют сходство с известной формулой Ричардсона–Дешмана, однако в данном случае из-за малого размера кластера внешняя ионизация даже небольшого количества электронов существенно изменяет температуру плазмы, что не свойственно для массивного образца. Этот размерный эффект является принципиальным отличием кластерной наноплазмы от плазмы металлов.

Поскольку система уравнений [547] может быть решена лишь численно, была проведена простая оценка потерь энергии кластером при эмиссии электронов. Предполагая, что каждый вылетевший электрон должен преодолеть потенциальный барьер $U_b = Ze^2/R_i$, нетрудно получить простое соотношение между изме-

нением числа частиц в кластере и установившейся температурой

$$Z_{\text{fin}}^2 = \frac{3N_i R_i}{e^2} k_B (T_0 - T_{\text{fin}}). \quad (4.2)$$

Это выражение верно в том случае, если $U_b \gg k_B T$ и эмиссия электронов происходит достаточно медленно, кроме того, оно не учитывает изменение потенциальной энергии электронов.

В [410] на основе модели желе (4.1) и описанной выше схемы моделирования было проведено подробное исследование зависимости установившегося заряда кластера от его размера и начальной температуры плазмы в диапазоне $R_i = (14 - 40) a_B$, $T_0 = (0.5 - 4) \text{ эВ}$. В результате была получена эмпирическая формула

$$Z_{\text{fin}} = c_1 R_i k_B T_{\text{fin}}, \quad (4.3)$$

где $c_1 = 0.65 (a_B \text{ эВ})^{-1}$. Характер данной зависимости был подтвержден и в данной работе (рисунок 4.11б), причем она остается справедливой для различного типа межчастичных взаимодействий. Однако, после обработки всех данных, включая данные [410], было получено несколько скорректированное значение коэффициента $c_1 = (0.55 \pm 0.06) (a_B \text{ эВ})^{-1}$.

Эти данные не противоречат рисунку 4.9б, на котором показатель степени $Z_{\text{fin}} \sim N_i^\alpha$ при постоянной температуре T_{fin} меньше значения $\alpha < 1/3$, следующего из (4.3) и соотношения $R_i = (3n_i N_i / 4\pi)^{1/3}$. Поскольку для построения рисунка 4.9б использовалась остановка ионов в различные моменты разлета кластера, то концентрация ионов n_i не являлась постоянной. С учетом фактического радиуса кластера R_i , полученного из рисунка 4.9а, результаты для Z_{fin} укладываются на зависимость (4.3) с учетом статистической погрешности.

Сопоставление формулы (4.3) и модели охлаждения кластера в результате эмиссии (4.2) дает возможность рассчитать изменение температуры в зависимости от размера кластера и плотности электронов

$$k_B (T_0 - T_{\text{fin}}) = \frac{e^2 c_1^2 k_B^2 T_{\text{fin}}^2}{4\pi n_e R_i^2} = c_2 \left(\frac{k_B T_{\text{fin}}}{R_i} \right)^2, \quad (4.4)$$

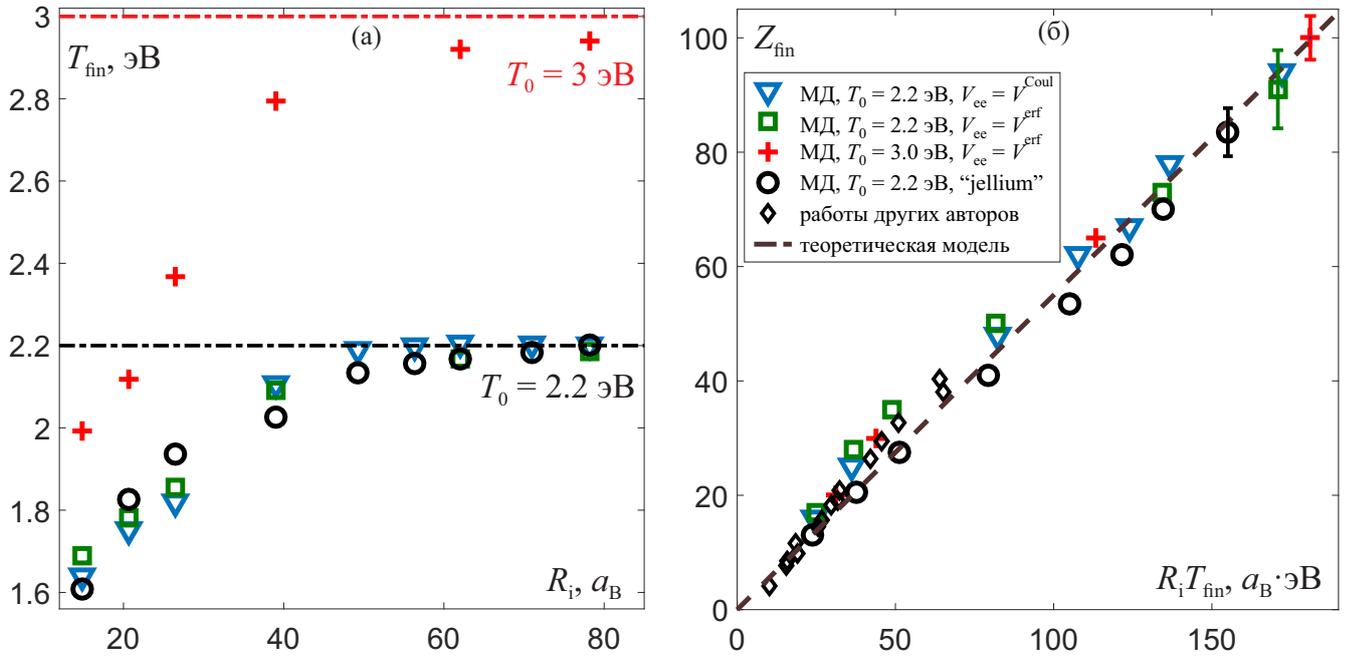


Рис. 4.11. (а) Установившаяся температура наноплазмы в зависимости от размера кластера при двух начальных температурах T_0 , горизонтальные линии — значения $T_0 = 3$ эВ (верхняя линия) и 2.2 эВ (нижняя линия). (б) Установившийся заряд кластера в зависимости от произведения размера кластера на температуру T_{fin} , пунктир — аппроксимация (4.3), ромбы — результаты [410]. Использованные модели взаимодействия частиц и значения T_0 для обоих графиков указаны на рисунке (б); концентрация ионов в кластере $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

где $c_2 = e^2 c_1^2 / (16\pi^2 \epsilon_0 n_e) = (165 \pm 35) a_B^2 / \text{эВ}$ для рассматриваемой плазмы. Эта оценка находится в хорошем согласии с результатами моделирования (рисунк 4.9а).

4.3. Колебания электронов в кластерной наноплазме

4.3.1. Расчет автокорреляционной функции тока

Как было отмечено ранее, одной из целей работы, описанной в данной главе, исследование резонансного поглощения лазерного излучения на колебаниях электронов в наноплазме, наблюдавшееся при облучении кластеров из различных веществ двумя последовательными фемтосекундными импульсами по схеме “pump-probe”. Для этого необходимо выявить основные моды колебаний электронов в кластере, определить их частоты и декременты затухания. Колебания в кластерной наноплазме существенно отличается от случая однородной плазмы, рассмотренного в главе 2 из-за существенной роли поверхностных эффектов.

В главе 2 был изложен метод расчета автокорреляционной функции тока (АФТ) $K_{jj}(t)$ (2.6) и связанной с ней динамической проводимости $\sigma(\omega)$ (2.30), которая определяет отклик среды на воздействие электрического поля с частотой ω . В случае наноплазмы для расчета автокоррелятора $K_{jj}(t)$ использовался полный ток всех электронов, оставшихся в кластере после внешней ионизации.

На рисунке 4.12а показан пример расчета автокорреляторов тока $K_{jj}(t)$ и скорости $K_{vv}(t) = \langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t) \rangle / \langle \mathbf{v}^2(0) \rangle$ для кластера Na_{55} . При расчете $K_{vv}(t)$ усреднение проводится по времени и по электронам кластера, а при расчете $K_{jj}(t)$ — только по времени. Для усреднения по времени использовалась квазиравновесная часть траектории.

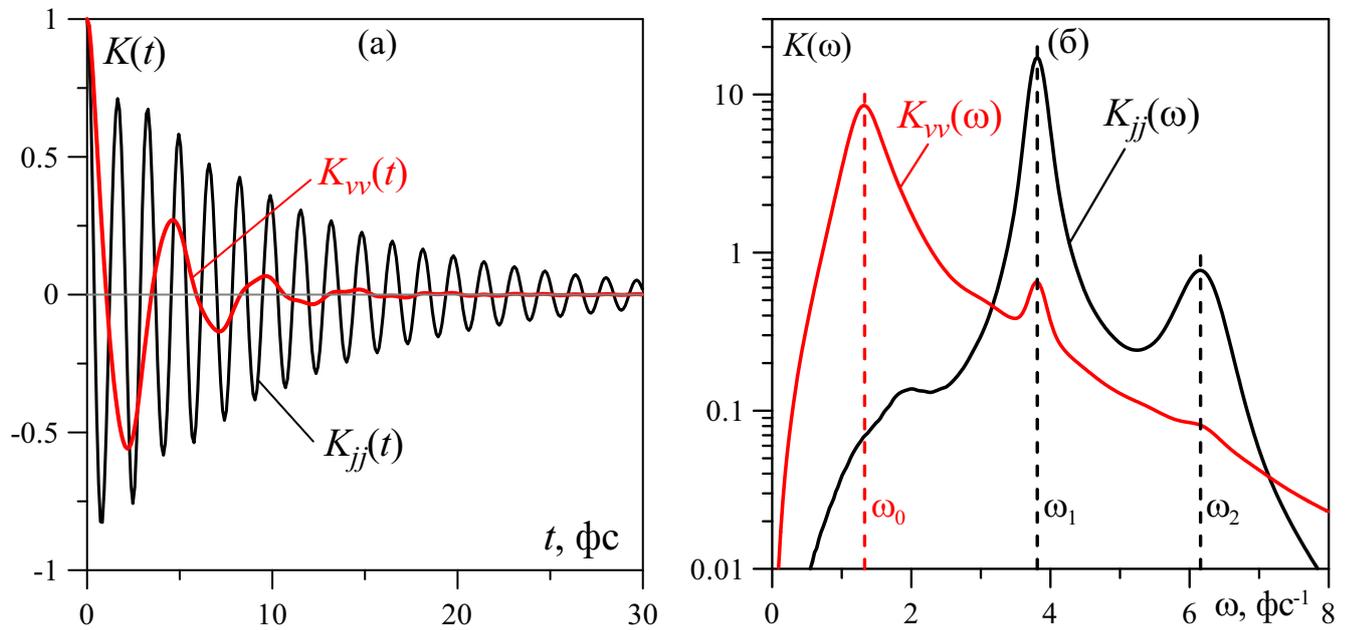


Рис. 4.12. (а) Нормированная автокорреляционная функция тока $K_{jj}(t)$ и скорости электрона $K_{vv}(t)$ для наноплазмы кластера Na_{55} . (б) Действительная часть Фурье преобразования для указанных автокорреляторов, штриховыми линиями обозначены позиции максимумов. Параметры плазмы указаны в первой строке таблицы 4.1.

Как и в случае, описанном в разделе 2.3, на АФТ наблюдаются выраженные колебания, создаваемые средним полем, действующим на все электроны кластера (см. рисунки 2.6 и 2.8), только в данном случае среднее поле не добавляется в уравнения движения искусственно, а возникает из-за поляризации кластера. В отличие колебаний электронов, рассмотренных в разделах 2.3 и 2.4, система имеет сферическую геометрию, и это обуславливает специфику полученных спектров.

На рисунке 4.12б показана нормированная действительная часть пре-

образования Фурье для указанных автокорреляторов: $K_{jj}(\omega)$ и $K_{vv}(\omega) = \omega_p \int_0^\infty e^{i\omega t} K_{vv}(t) dt$. Здесь также выделены положения наиболее интенсивных максимумов: ω_0 для $K_{vv}(\omega)$ и ω_1, ω_2 для $K_{jj}(\omega)$.

Первый максимум с частотой ω_0 на автокорреляторе $K_{vv}(\omega)$ соответствует одноэлектронным осцилляциям в кластере. Грубая оценка этой частоты может быть получена по формуле для гармонического осциллятора

$$\omega_{\text{single}}^2 = \frac{1}{m_e} \left. \frac{\partial^2 U_{\text{cl}}}{\partial z^2} \right|_{z=0}, \quad (4.5)$$

где U_{cl} — суммарный потенциал электронов и ионов в кластере (кривая 3 на рисунке 4.8). Для кластера Na_{55} в момент t_0 найденное таким образом значение $\omega_0^{\text{harm}} = 0.87 \text{ фс}^{-1}$, тогда как полученное из МД моделирования $\omega_0 = 1.3 \text{ фс}^{-1}$, что говорит о существенном ангармонизме колебаний. Поскольку фазы одноэлектронных колебаний не синхронизированы, они не вносят вклад в полный ток, и $K_{jj}(\omega)$ не имеет соответствующего максимума на частоте ω_0 .

Рассмотрим теперь коллективные колебания электронов, которые приводят к появлению максимумов АФТ на частотах ω_1 и ω_2 . Зависимость АФТ от размера кластера, определяемого моментом остановки ионов, и числом электронов в кластере показана на рисунке 4.13. Для сравнения на рисунке 4.13б приведен также спектр АФТ для пространственно однородной плазмы с периодическими граничными условиями для той же модели взаимодействия частиц и средней концентрации электронов. Полученные из МД моделирования значения ω_1 и ω_2 для различных параметров наноплазмы приведены также в таблицах 4.1 – 4.4. Из таблиц видно, что частота ω_1 близка к частоте колебаний Ми

$$\omega_{\text{Mie}} = \left(\frac{4\pi e^2 n_i}{3m_e} \right)^{1/2}, \quad (4.6)$$

а частота ω_2 — к плазменной частоте ω_p , но в точности эти частоты не совпадают — для обоих присутствует смещение в область более низких частот (красный сдвиг спектра). Для уточнения причины этих различий рассмотрим пространственную структуру указанных электронных колебаний.

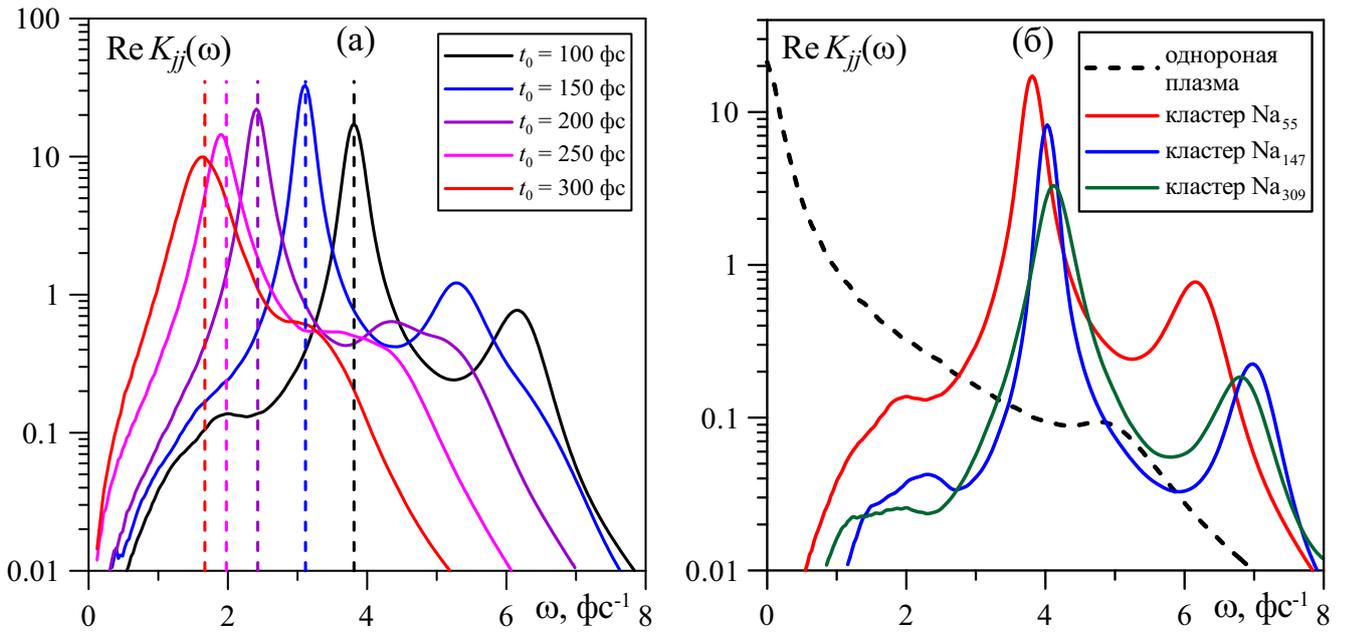


Рис. 4.13. Действительная часть Фурье преобразования АФТ: (а) для наноплазмы кластера Na_{55} в различные моменты остановки ионов t_0 (параметры плазмы указаны в таблице 4.1); (б) для кластеров различного размера (указаны на графике) при $t_0 = 100$ фс. Вертикальные линии на рисунке (а) — теоретическая модель ω_1^{theor} , Положения наиболее выраженных первого и второго максимумов на рисунке (б) обозначены как ω_1 и ω_2 , штриховая линия соответствует результату для пространственно однородной плазмы.

4.3.2. Анализ пространственной структуры колебаний электронов

Для исследования пространственной структуры электронных колебаний область, занимаемая наноплазмой, разбивалась ячейки с помощью однородной сетки в сферической системе координат (r, θ, ϕ) (рисунок 4.14). Для каждой ячейки с номером k определялась локальная плотность тока электронов

$$\mathbf{j}_k(t) = -\frac{e}{\Delta V_k} \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{v}_i(t) \delta_{\Delta V_k}(\mathbf{r}_i(t)), \quad (4.7)$$

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. Размер ячеек определяет пространственное разрешение, с которым функция $\mathbf{j}_k(t)$ приближает распределение плотности тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}_k, t) = \lim_{\Delta V_k \rightarrow 0} \mathbf{j}_k(t)$, где \mathbf{r}_k — центр ячейки k . В то же время уменьшение объема ячейки увеличивает статистическую ошибку усреднения, так как необходимо чтобы в ячейке находилось достаточное число электронов. В процессе расчетов было выбрано оптимальное число ячеек, которое варьировалось в

диапазоне $N_c = N_r N_\theta N_\phi = 64 - 256$.

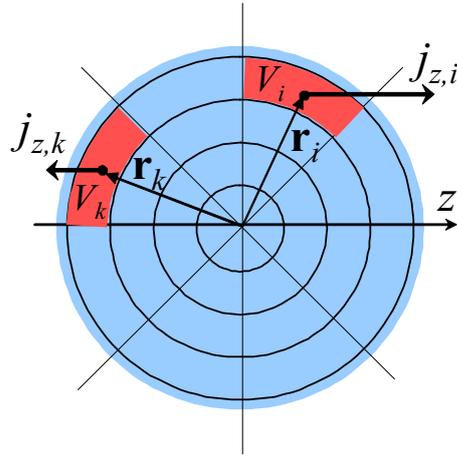


Рис. 4.14. Разбиение области наноплазмы на ячейки для вычисления локальных плотностей тока.

Локальная плотность тока использовалась для расчета пространственно-разрешенной автокорреляционной функции

$$K'_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t) = \frac{\langle \mathbf{j}_k(0) \mathbf{j}_l(t) \rangle}{\langle \mathbf{j}^2(0) \rangle}. \quad (4.8)$$

Здесь необходимо учесть, что при малом среднем числе электронов в ячейках переход электрона из одной ячейки в другую приводит к возникновению дополнительного слагаемого в (4.8), которое не имеет отношения к коллективным колебаниям тока, а является следствием конечного точечного заряда электрона. С учетом этого окончательное выражения для пространственно-разрешенной АФТ имеет вид

$$K_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t) = \frac{1}{\langle \mathbf{j}^2(0) \rangle} \left\langle \mathbf{j}_k(0) \mathbf{j}_l(t) - \frac{e^2}{\Delta V_k \Delta V_l} \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{v}_i(t) \mathbf{v}_i(0) \delta_{\Delta V_k}(\mathbf{r}_i(0)) \delta_{\Delta V_l}(\mathbf{r}_i(t)) \right\rangle, \quad (4.9)$$

где исключена та часть $K'_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t)$, которая связана переходом электрона i из ячейки k в момент времени 0, в ячейку l в момент времени t .

Поскольку корреляция между взаимно ортогональными компонентами тока мала по сравнению с корреляцией между параллельными компонентами, т.е. $\langle j^x, j^z \rangle \ll \langle j^z, j^z \rangle$, в дальнейшем в выражении (4.9) мы будем рассматривать только

корреляцию между сонаправленными компонентами тока с последующим усреднением по всем направлениям.

Для функции $K_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t)$ можно выполнить Фурье-преобразование аналогично (2.30)

$$K_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, \omega) = \omega_p \int_0^{\infty} e^{i\omega t} K_{jj}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l, t) dt. \quad (4.10)$$

Набор пространственных мод для каждой частоты ω определяется решением задачи на собственные значения

$$\hat{\mathbf{K}}\Psi_m = \lambda_m \Psi_m, \quad \Psi_m(r, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} \Psi_{r_1, \theta_1, \phi_1} \\ \vdots \\ \Psi_{r_{N_r}, r_{N_\theta}, r_{N_\phi}} \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

где матрица $\hat{\mathbf{K}}$ составляется из действительной части компонент функции (4.10):

$$\hat{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \text{Re } K_{jj}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \omega) & \dots & \text{Re } K_{jj}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_{N_c}, \omega) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Re } K_{jj}(\mathbf{r}_{N_c}, \mathbf{r}_1, \omega) & \dots & \text{Re } K_{jj}(\mathbf{r}_{N_c}, \mathbf{r}_{N_c}, \omega) \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

λ_m — собственное значение, а $\Psi_m(r, \theta, \phi)$ — собственный вектор, определяющий распределение амплитуды колебаний по ячейкам для моды с номером m .

Характерную (резонансную) частоту колебаний для моды m можно получить, рассмотрев зависимость ее собственного значения от частоты $\lambda_m(\omega)$. Такие зависимости для наиболее значимых мод показаны на рисунке 4.15, а на рисунках 4.17 – 4.21 изображены распределения амплитуд колебаний Ψ в указанных модах для кластера Na_{55} по координатам r и θ . Для всех представленных мод распределение по ϕ является однородным, поэтому по этой координате производится усреднение. Распределения амплитуд показаны для резонансных частот, значения которых приведены на графиках.

Стрелками на рисунках 4.17 – 4.21 показаны относительные амплитуды и направления движения различных частей электронного облака, соответствующие величине и знаку $\Psi(r, \theta)$. Эти рисунки показывают, что, например, моды “4”, “1-1”

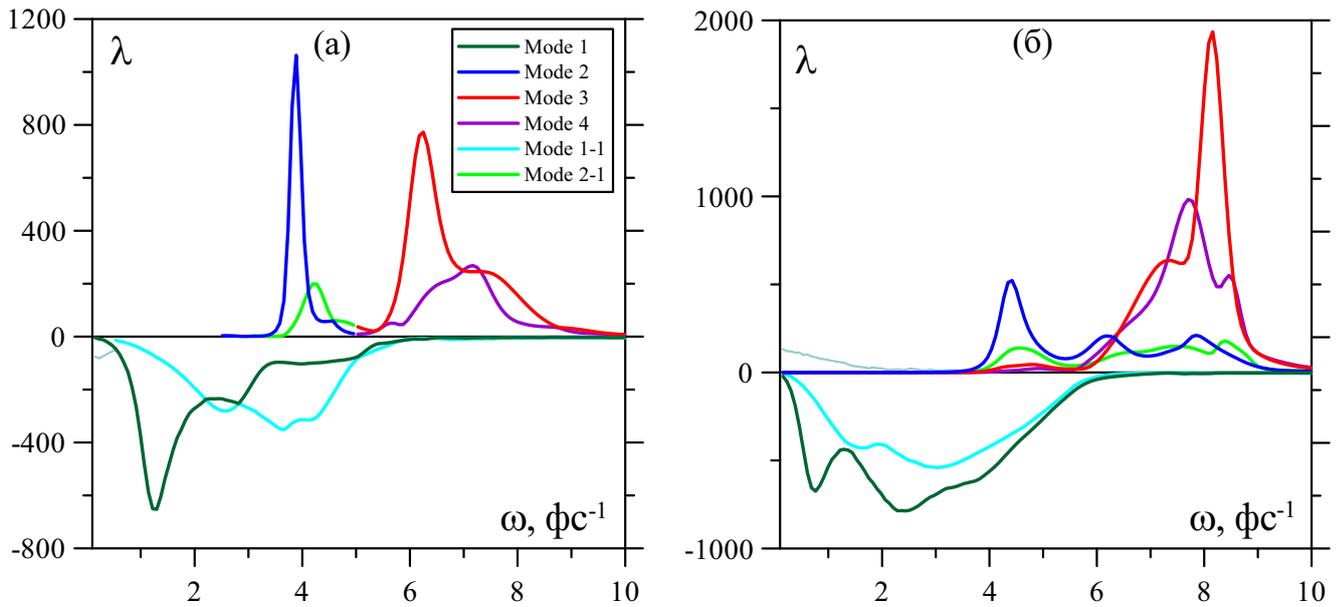


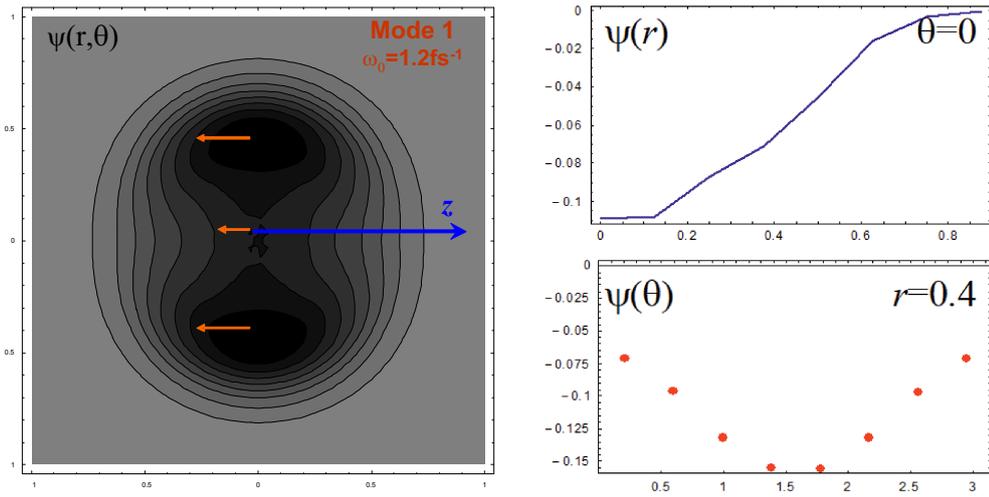
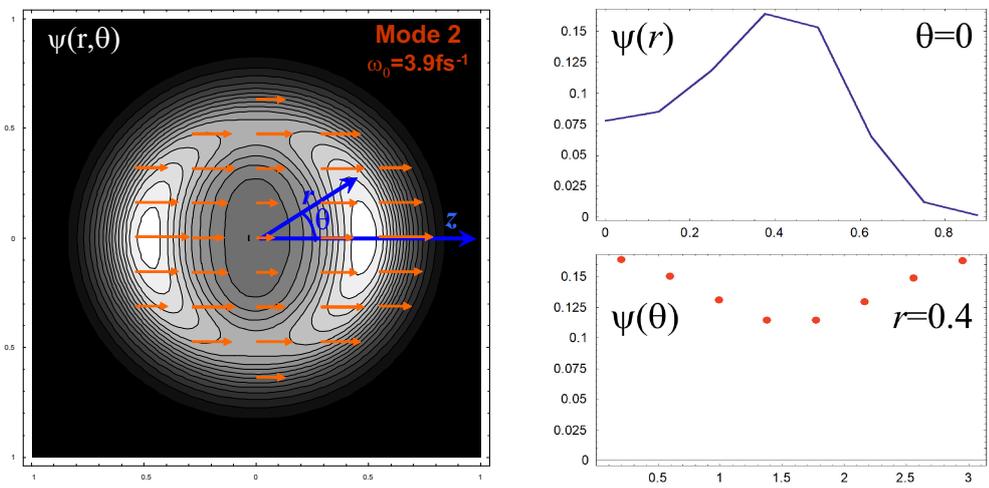
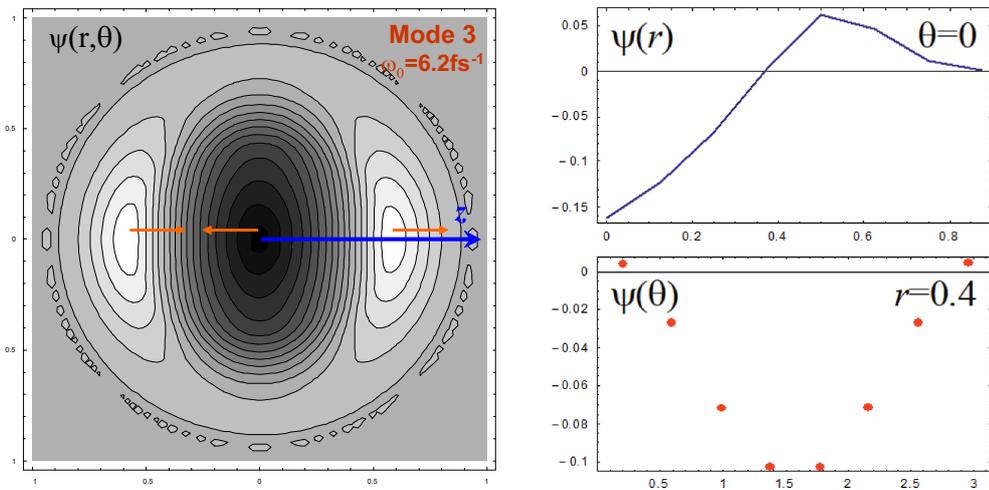
Рис. 4.15. Собственные значения, полученные в результате решения уравнения (4.11), в зависимости от частоты: (а) кластер Na_{55} , параметры плазмы указаны в первой строке таблиц 4.1, (б) кластер Na_{309} , параметры плазмы указаны в первой строке таблиц 4.3. Условные названия мод колебаний показаны на графике.

и “1-2” являются симметричными ($\Psi(\theta)$ меняет знак), поэтому на автокорреляторе полного тока максимумы на их резонансных частотах отсутствуют. Рассмотренная ранее мода “1” с частотой ω_0 имеет малую амплитуду, а наиболее выраженный вклад в общий ток дают моды “2” и “3” с частотами ω_1 и ω_2 , соответственно.

Моду “2” мы в дальнейшем будем называть поверхностными плазмонами. Рисунок 4.17 показывает, что движения электронов в ней происходят однонаправленно, как и в случае классических колебаний Ми, однако распределение амплитуды $\Psi(r)$ не является однородным. Мода “3” (рисунок 4.18) напоминает ленгмюровские плазменные колебания в сферическом ограничивающем потенциале кластера, их мы будем называть объемными плазмонами.

4.3.3. Теоретическая модель коллективных колебаний электронов в наноплазме

Формула для частоты Ми (4.6) получена в предположении, что электроны и ионы представляют собой две однородно заряженные сферы радиуса R , причем форма этих сфер не меняется при отклонении от положения равновесия (рисунок 4.22а). Результаты моделирования показывают, что пространственное

Рис. 4.16. Распределение амплитуды колебаний для моды “1” кластера Na_{55} .Рис. 4.17. Распределение амплитуды колебаний для моды “2” кластера Na_{55} .Рис. 4.18. Распределение амплитуды колебаний для моды “3” кластера Na_{55} .

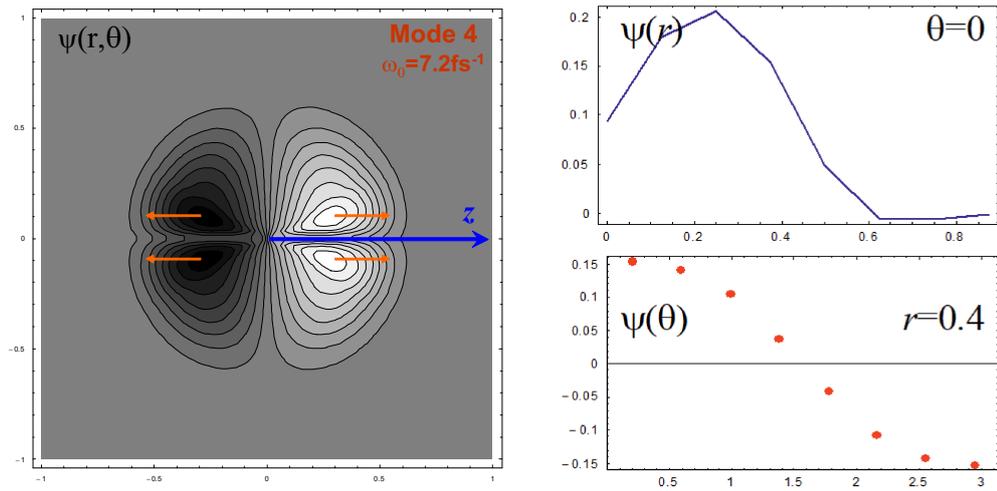


Рис. 4.19. Распределение амплитуды колебаний для моды “4” кластера Na_{55} .

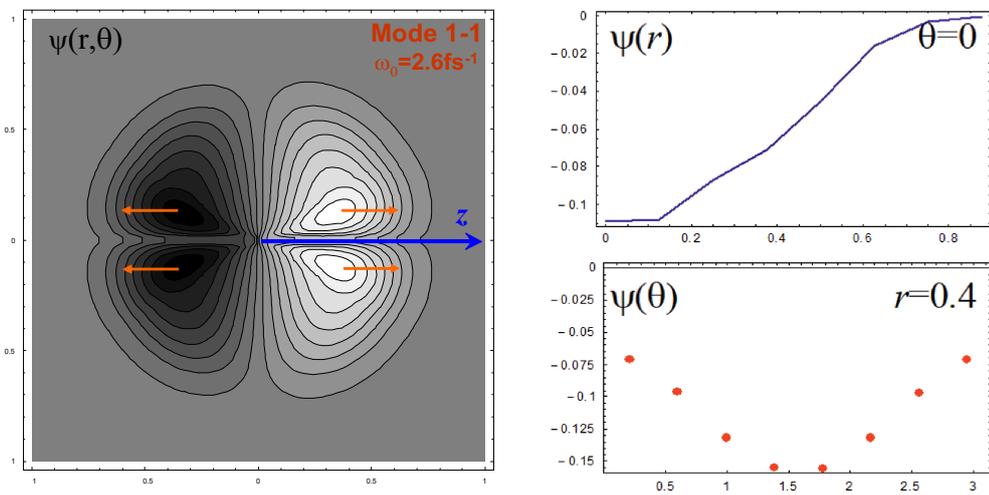


Рис. 4.20. Распределение амплитуды колебаний для моды “1-1” кластера Na_{55} .

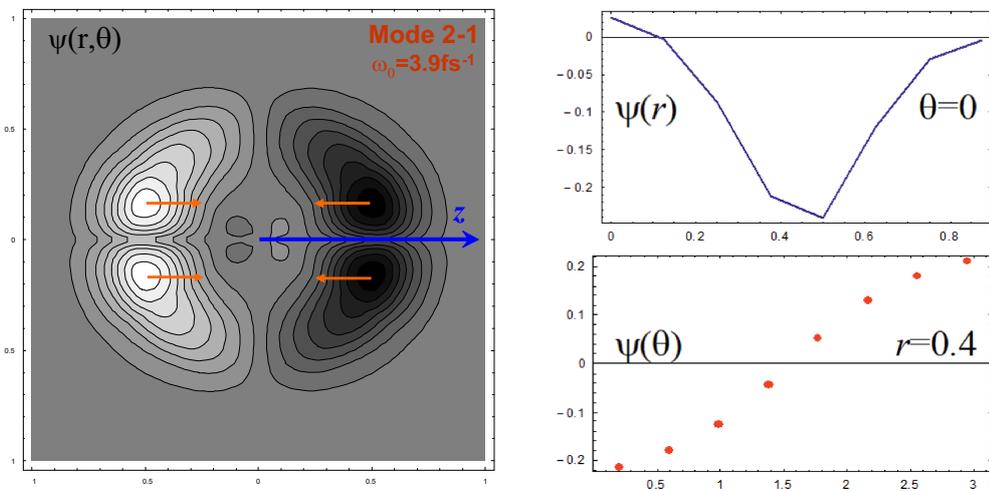


Рис. 4.21. Распределение амплитуды колебаний для моды “2-1” кластера Na_{55} .

распределение электронов отличается от однородного (рисунок 4.10), колебания в основном происходят во внешнем слое плазмы (рисунок 4.17). Кроме того, следует учесть, что в МД расчетах потенциал электрон-ионного взаимодействия не является чисто кулоновским из-за отсечки на малых расстояниях. Попробуем оценить влияние этих эффектов на частоту поверхностных плазмонов.

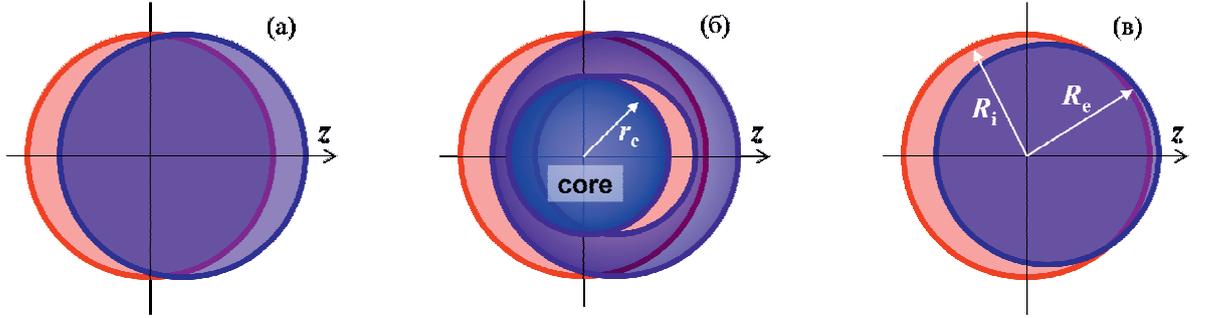


Рис. 4.22. Модели колебаний электронов в плазме (поверхностных плазмонов): (а) колебания Ми, (б) колебания внешнего слоя наноплазмы (4.17), (в) модель с однородными сферическими распределениями заряда электронов и ионов разного радиуса. Синяя сфера радиуса R_e — распределение электронов, красная сфера радиуса R_i — распределение ионов, r_c — радиус внутренней области кластера для модели (4.17).

Рассмотрим колебания электронов в линейном приближении, считая что распределение электронов сферически симметрично и задается функцией $n_e(r)$, которая не меняется со временем. Будем считать, что при $z = 0$ центр распределения $n_e(r)$ совпадает с центром кластера и электронное облако находится в равновесии. Малые отклонения вдоль оси z будут вызывать колебания с частотой

$$\omega_{\text{sp}}^2 = \frac{1}{N_e m_e} \left. \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right|_{z=0}. \quad (4.13)$$

В отличие от формулы (4.5) потенциал U здесь определяет энергию взаимодействия всего электронного облака с ионным остовом. Он может быть выражен через потенциал взаимодействия одного электрона с ионным остовом $U_e(r)$ и профиль электронной плотности $n_e(r)$:

$$\begin{aligned} U(z) &= \iiint n_e(\mathbf{r}) U_e(|\mathbf{r} - z\mathbf{e}_z|) d^3\mathbf{r} \\ &= 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty n_e(r) U_e\left(\sqrt{r^2 - 2rz\cos\theta + z^2}\right) r^2 dr. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Подставляя это выражение в формулу (4.13) и выполняя дифференцирование под знаком интеграла, получим

$$\begin{aligned}\omega_{\text{sp}}^2 &= \frac{2\pi}{N_e m_e} \int_0^\infty n_e(r) r^2 dr \int_{-1}^1 \left[U_e''(r) \cos^2 \theta + \frac{U_e'(r)}{r} (1 - \cos^2 \theta) \right] d \cos \theta \\ &= \frac{4\pi}{3N_e m_e} \int_0^\infty n_e(r) \left[U_e''(r) + \frac{2U_e'(r)}{r} \right] r^2 dr.\end{aligned}\quad (4.15)$$

Из рисунка 4.17 видно, что в случае поверхностных плазмонов колебания совершают во основном внешние слои кластера, поэтому первая из рассматриваемых нами моделей состоит в том, что часть электронов вблизи ядра кластера $n_{e,\text{core}}(r)$ считается неподвижной, а оставшаяся внешняя часть $n_{e,\text{out}}(r)$ совершает колебания, дающие вклад в АФТ (рисунок 4.22б). Концентрацию электронов внутри каждой из частей можно положить равной константе n_e :

$$n_e(r) = n_{e,\text{core}}(r) + n_{e,\text{out}}(r), \quad (4.16)$$

$$n_{e,\text{core}}(r) = \begin{cases} n_e, & r \leq r_c, \\ 0, & r > r_c, \end{cases} \quad n_{e,\text{out}}(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_c, \\ n_e, & r > r_c. \end{cases} \quad (4.17)$$

где $r_c < R_i$ — некоторый радиус, разделяющий внутреннюю и внешнюю часть кластера.

Определим потенциал электрона $U_e(r)$, находящего в поле однородной сферы ионов $n_i(r)$ и всех электронов из внутренней части кластера $n_{e,\text{core}}(r)$:

$$U_e(r) = \sum_d U_{ed}(r), \quad d = e, i, \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned}U_{ed}(r) &= \iiint n_d(\mathbf{r}') V_{ed}(r)(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) d^3 \mathbf{r}' \\ &= 2\pi \int_0^\infty n_d(r') r'^2 dr' \int_{-1}^1 V_{\alpha e} \left(\sqrt{r'^2 - 2r'r \cos \theta + r^2} \right) d \cos \theta.\end{aligned}\quad (4.19)$$

Если потенциал межчастичного взаимодействия описывается формулой

$$V_{ed}(r) = -\frac{eq_d}{r} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\lambda_{ed}}\right), \quad (4.20)$$

то интеграл по θ в (4.19) может быть вычислен

$$U_{ed}(r) = -\frac{2\pi eq_d}{r} \int_0^\infty n_d(r') \left[(r+r') \operatorname{erf}\left(\frac{r+r'}{\lambda_{ed}}\right) - |r-r'| \operatorname{erf}\left(\frac{|r-r'|}{\lambda_{ed}}\right) - \frac{2\lambda_{ed}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r^2+r'^2}{\lambda_{ed}^2}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2rr'}{\lambda_{ed}^2}\right) \right] r' dr'. \quad (4.21)$$

Подстановка в выражение (4.21) профилей электронов $n_{e,\text{core}}(r)$ и ионов $n_i(r)$ из (4.17), а затем использование полученной функции $U_e(r)$ в выражении (4.15) дает значения частоты ω_{sp} , указанные в таблицах 4.1 – 4.3, а также пунктирными линиями на рисунке 4.13а. Для профилей электронов были выбраны значения параметра: $r_c = 4$ нм для кластера Na_{55} , $r_c = 5.05$ нм для кластера Na_{147} , $r_c = 8.14$ нм для кластера Na_{5309} . Как видно, теоретическая оценка частоты ω_{sp} находится ближе к ω_1 , определенной из положения максимума АФТ, чем частота Ми ω_{Mie} .

Недостатком представленной модели является необходимость определения параметра r_c , разделяющего внутреннюю и внешнюю часть кластера. Значение этого параметра можно получить из анализа пространственной структуры колебаний, но точность такого метода невысока. Кроме того, данная модель не учитывает изменение формы профиля $n_{e,\text{out}}(r)$ и уменьшения числа электронов за счет внешней ионизации.

Вторая рассмотренная здесь модель предполагает синхронные колебания всех электронов, однако в качестве профиля концентрации $n_e(r)$ выбирается сфера радиуса $R_e < R_i$. Как показывают расчеты (см. рисунок 4.10) концентрация электронов в центре кластера не зависит от его размера и с хорошей точностью совпадает с концентрацией ионов n_i (именно это вызывает появление плато на суммарном потенциале кластера, показанном на рисунке 4.8а). Таким образом, модель представляет собой колебания двух однородно заряженных сфер с одинаковой плотностью заряда и разным радиусом (рисунок 4.22в). Значение радиуса R_e

можно определить из числа оставшихся в кластере электронов, которое известно с хорошей точностью $R_e^3 = 3N_e/(4\pi n_i)$.

Подставляя выбранные распределения зарядов в формулы (4.21) и (4.15) можно получить

$$\begin{aligned} \omega_1^2(R_i, R_e) = \omega_{\text{Mie}}^2 \left\{ \frac{R_i^3 + R_e^3}{2R_e^3} \operatorname{erf} \left(\frac{R_i + R_e}{\lambda_{ei}} \right) - \frac{R_i^3 - R_e^3}{2R_e^3} \operatorname{erf} \left(\frac{R_i - R_e}{\lambda_{ei}} \right) \right. \\ \left. + \frac{e^{-\frac{R_i^2 + R_e^2}{\lambda_{ei}^2}}}{\sqrt{\pi} R_e^3} \left[\left(\frac{\lambda_{ei}^3}{2} - \lambda_{ei} (R_i^2 + R_e^2) \right) \sinh \left(\frac{2R_i R_e}{\lambda_{ei}^2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \lambda_{ei} R_i R_e \cosh \left(\frac{2R_i R_e}{\lambda_{ei}^2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Это выражение удобно отсутствием необходимости выполнять численное интегрирование. В пределе $R_e = R_i$, $\lambda_{ei} \rightarrow 0$ оно переходит в частоту Ми.

4.3.4. Сравнение теоретической модели с результатами моделирования

Для проверки указанных выше теоретических моделей были проведены расчеты АФТ в широком диапазоне размеров кластера при фиксированной плотности ионов. В каждом случае использовался алгоритм вывода на равновесие с заданной температурой, описанный в подразделе 4.2.2. Для моделирования были выбраны параметры плазмы: $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $T_e = 1$ и 2.2 эВ, что соответствует параметру неидеальности $\Gamma = 6.96$ и 3.17 . Основным результатом представлен на рисунке 4.23. Профили распределения электронов для тех же параметров кластера, но большей температуры были представлены ранее на рисунке 4.10. Расчеты проводились с использованием графических ускорителей.

Как и в предыдущих расчетах на всех спектрах АФТ хорошо видна основная мода колебаний, соответствующая поверхностным плазмонам. При большей температуре колебания являются несколько менее выраженными, однако общая форма зависимости сохраняется. Зависимость частоты ω_1 от размера кластера показана на рисунке 4.24а. Как и ожидалось с увеличением размера кластера роль поверхностных эффектов убывает, поэтому частота ω_1 приближается к теоретическому значению ω_{Mie} . При этом следует отметить, что в пределе $N_i \rightarrow \infty$ данная

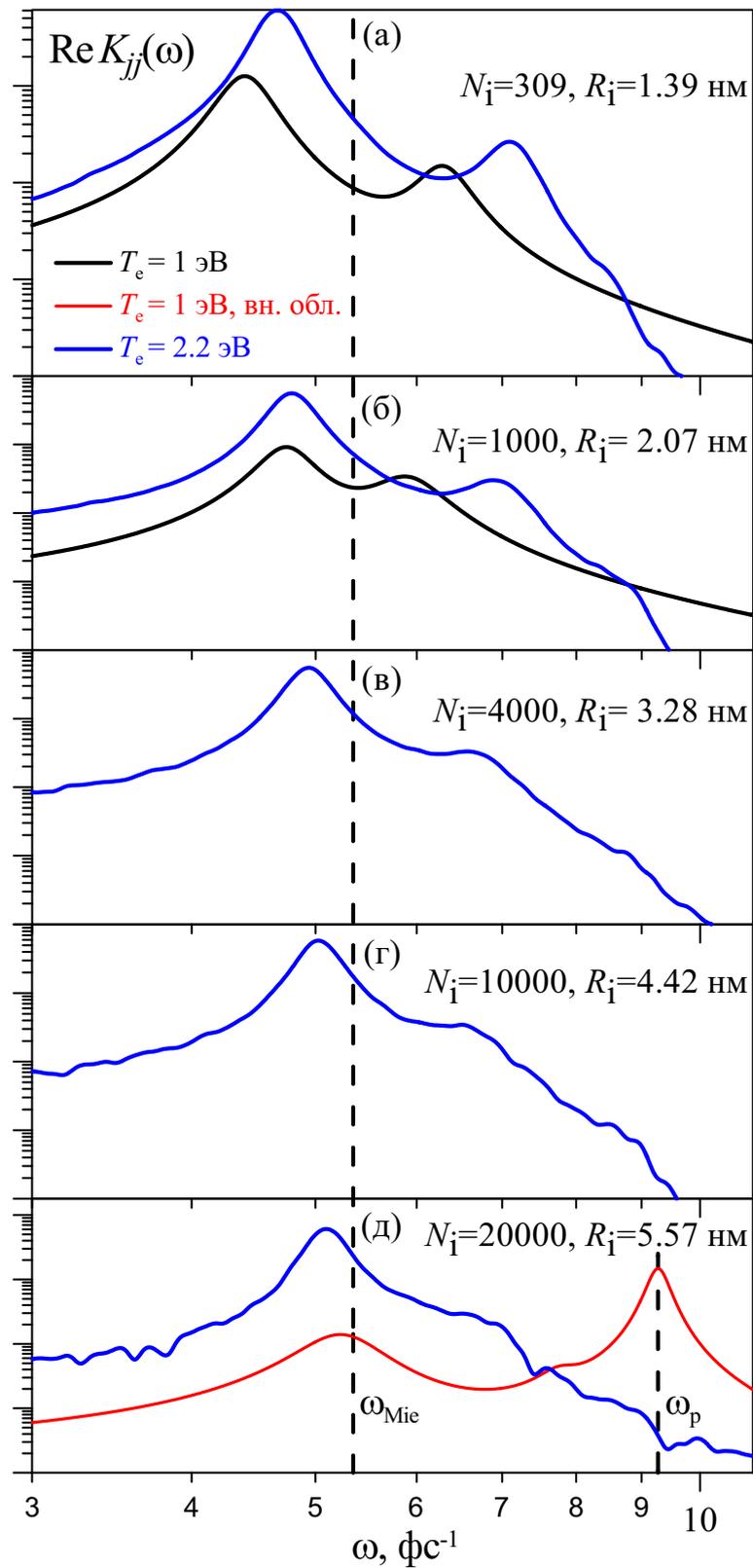


Рис. 4.23. Действительная часть Фурье-преобразования АФТ в зависимости от размера кластера при фиксированной концентрации ионов $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и различных температурах электронов. Красная линия на рисунке (д) — расчет по внутренней области кластера. Число ионов N_i , размер кластера R_i и температура электронов T_e указаны на графиках, вертикальные штриховые линии — частота Ми ω_{Mie} и плазменная частота ω_p .

система не эквивалентна однородной плазме с периодическими граничными условиями из-за наличия открытых поверхностей.

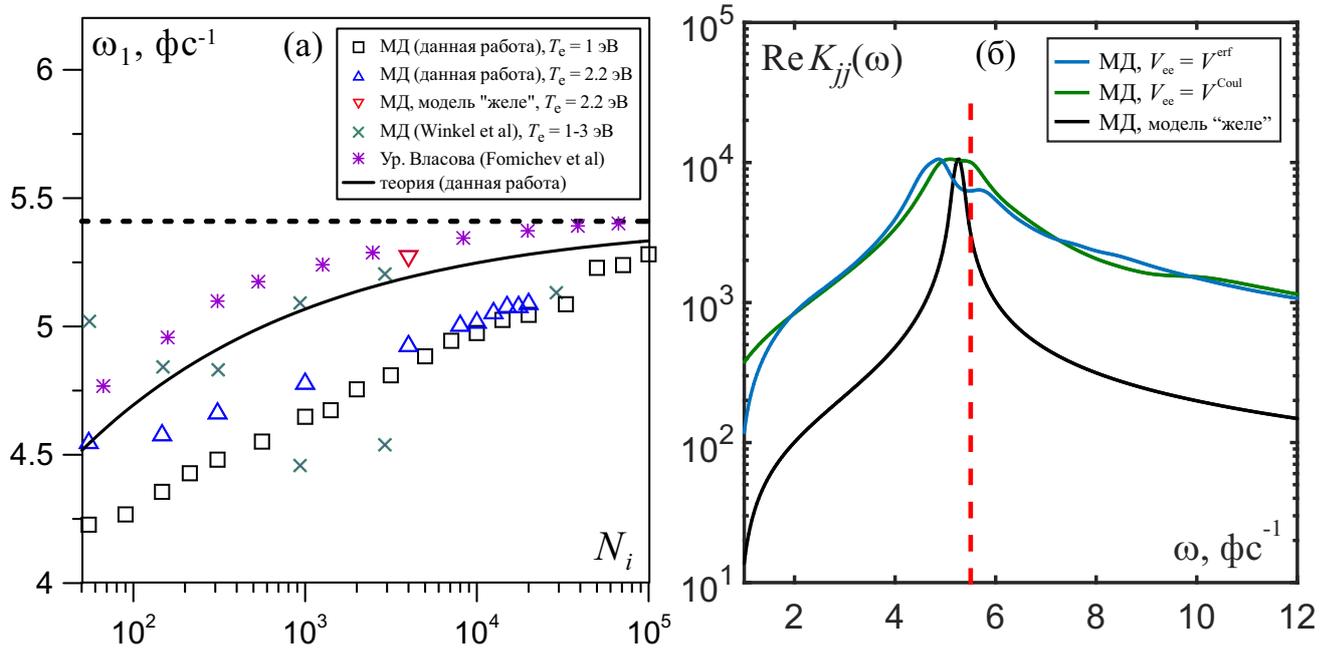


Рис. 4.24. (а) Резонансная частота поверхностных плазмонов в зависимости от количества ионов в кластере: квадраты и треугольники — данная работа ($T_e = 1$ и 2.2 эВ), крестики — данные [419], звездочки — данные [548], сплошная линия — теоретическая формула (4.22), штриховая линия частота Ми $\omega_{\text{Мие}}$. (б) Действительная часть Фурье преобразования АФТ для кластера Na_{4000} при использовании различных типов электрон-электронного взаимодействия и модели “желе”, $T_e = 2.2$ эВ, $n_i = 2.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$.

Смещение ω_1 для малых кластеров в красную область спектра наблюдалось также в работах [419, 548]. Несмотря на различия в параметрах плазмы, рисунок показывает, что в целом все данные имеют одинаковый характер зависимости частоты от N_i . Полученные в [419] спектры АФТ имеют большее количество резонансов, что, возможно, связано с погрешностями Фурье-преобразования или недостаточной статистикой. На рисунке приведены частоты первых двух максимумов.

Описанная в предыдущем подразделе теоретическая модель (4.22) показана на рисунке 4.24а сплошной линией. Эта модель также хорошо воспроизводит общий характер зависимости, но лежит ближе к расчетам, выполненным с помощью решения уравнения Власова [548]. Данный результат вполне объясним, так как модель (4.22) не учитывает деформацию профиля электронов, в том числе за счет столкновительных эффектов. Близкий к [548] результат дает и модель “желе” (4.1)

(красный треугольник при $N_i = 4000$). Таким образом, дальнейшее совершенствование модели (4.22) должно быть направлено на учет более реалистичного профиля электронов и столкновительного затухания.

Сравнение результатов для различных типов электрон-электронного взаимодействия, а также модели “желе” показано на рисунке 4.24б. Данные для модели “желе” выделяется гораздо более узким пиком, соответствующему декременту затухания, на порядок меньшему, чем в случае обычной МД, из-за отсутствия электрон-ионных столкновений. График также демонстрирует некоторую зависимость частоты поверхностных плазмонов от типа взаимодействия, однако общая форма кривой сохраняется.

Возвращаясь к рисунку 4.23, обратим внимание на отсутствие максимума на плазменной частоте практически для всех исследованных параметров наноплазмы (резонанс на частоте $\omega \approx 7 \text{ фс}^{-1}$ имеет иную природу). Тем не менее, этот максимум хорошо проявляется на спектре собственных значений $\lambda(\omega)$ (см. рисунок 4.15) и может быть исследован таким образом.

Интересный результат может быть получен, если провести расчет АФТ не для полного кластера, а для его внутренней области, аналогично тому, как это было сделано для однородной плазмы в ячейке с отражающими стенками (раздел 2.4.3). В этом случае, как видно из рисунка 4.23д, получим хорошо выраженный максимум на плазменной частоте, что полностью согласуется с результатом, показанным на рисунке 2.19б.

Зависимости частот и декрементов затухания основных мод электронных колебаний в наноплазме от параметра неидеальности, показаны на рисунке 4.25. Из рисунка 4.25а видно, что отклонение частот ω_1 и ω_2 от своих теоретических значений в данном масштабе проявляется достаточно слабо и почти не зависит от плотности плазмы при постоянной температуре и числе ионов в кластере. Зависимость же декрементов затухания, полученных из полуширин соответствующих максимумов АФТ, от Γ хорошо повторяет теоретическую кривую [285] (см. (2.5)), хотя их абсолютные значения отличаются от случая однородной плазмы.

В целом этот результат подтверждает вывод работы [95] сделанный для ленгмюровских плазменных колебаний: частоты колебательных процессов в неидеальной плазме (ленгмюровских плазменных волн, поверхностных плазмонов в кла-

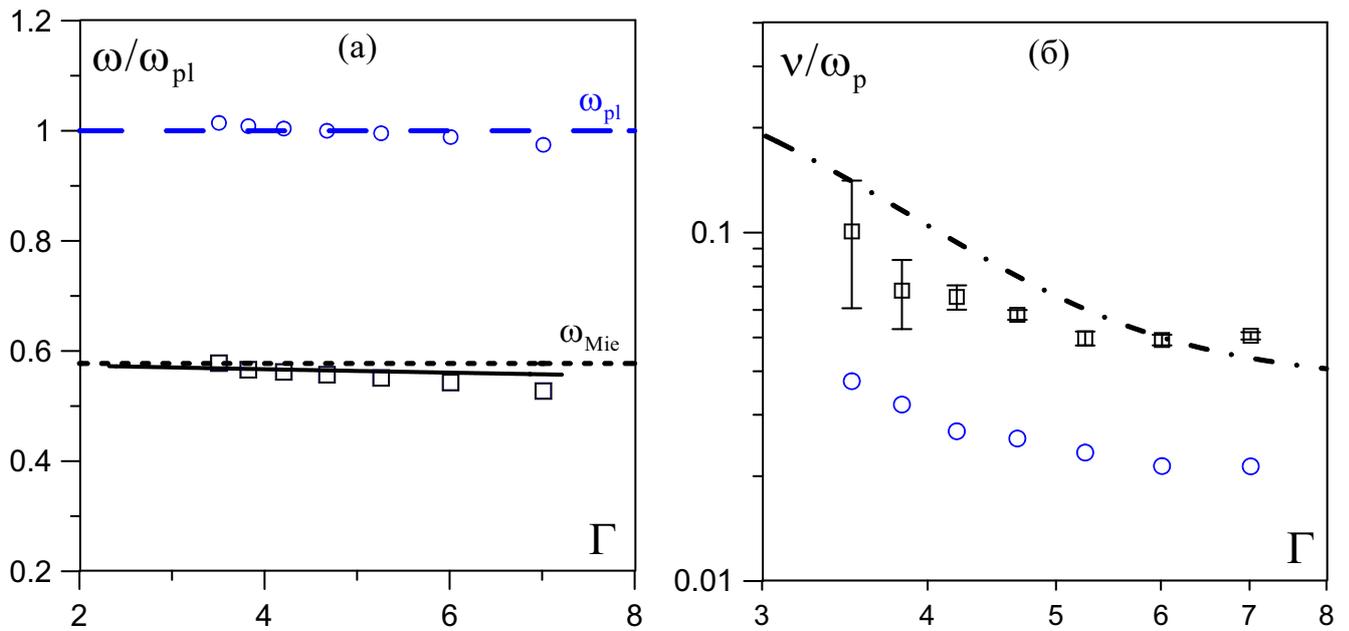


Рис. 4.25. Резонансная частота (а) и декремент затухания (б) для поверхностных (квадраты) и объемных (кружки) плазмонов в зависимости от параметра неидеальности для кластера Na_{7100} при температуре плазмы $T_e = 1$ эВ. Горизонтальные линии на рисунке (а) — значения плазменной частоты ω_p и частоты Ми ω_{Mie} , штрих-пунктирная линия на рисунке (б) — модель (2.5).

стерной наноплазме) достаточно слабо зависят от степени неидеальности и могут быть с хорошей точностью аппроксимированы аналитическими кривыми, полученными в приближении слабых столкновений, однако коэффициенты затухания довольно плохо описываются такого рода теоретическими моделями. Использование же декрементов затухания, полученных в МД моделировании, совместно с теоретическими моделями для идеальной плазмы позволяет хорошо описать имеющиеся данные экспериментов и компьютерного моделирования.

4.4. Выводы к четвертой главе

Исследования кластерной наноплазмы, описанные в данной главе, были мотивированы экспериментами, в которых наблюдался явно выраженный резонанс лазерного излучения с колебаниями электронов в кластере при облучении их двумя последовательными фемтосекундными лазерными импульсами. Поскольку эти 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 декре-

ментах затухания электронных колебаний в ионизованном кластере. Кроме того, эти эксперименты при правильной их интерпретации, могут служить источником дополнительных данных об эффективной частоте столкновений в неидеальной плазме, обсуждавшейся в главе 2.

В данной работе была предложена схема моделирования, позволяющая отдельно рассмотреть процессы в электронной подсистеме ионизованного кластера в различные моменты разлета ионов. С ее помощью было проведено исследование процесса релаксации электронов в кластерной наноплазме, получены установившиеся распределения электронов по энергиям, радиальный профиль концентрации электронов, средний заряд кластера и температура электронов в зависимости от плотности ионов, начальной температуры и числа ионов в кластере. Показано, что заряд кластера в рассмотренной области параметров можно считать линейно зависящим от произведения конечной температуры электронов на радиус кластера. Определен коэффициент этой зависимости.

Был предложен метод исследования пространственной структуры электронных колебаний в кластере, основанный на расчете пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока. Результатами этих исследований стала теоретическая модель коллективных колебаний электронов (поверхностных плазмонов), хорошо описывающая полученную в МД моделирования зависимость частоты этих колебаний от размера кластера с учетом неоднородного распределения электронов. Также были определены декременты затухания для колебаний Ми и ленгмюровских плазменных колебаний.

Результаты данной главы опубликованы в [7, 10, 12, 14, 15, 19, 23].

Глава 5

Развитие метода волновых пакетов для моделирования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества

В этой главе приведены результаты доработки метода молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП), расширяющем возможности классической МД, а также его применения к задачам моделирования неидеальной электрон–ионной плазмы и разогретого плотного вещества, рассмотренным в предыдущих главах. Общее описание метода МДВП и его модификаций приведено в разделе 1.3.6. В том же разделе отмечаются и его недостатки: а) неограниченное расширение (“расплывание”) волновых пакетов со временем для электронов вне области сильного взаимодействия; б) невысокая точность представления связанных состояний электронов и ионов для низколежащих квантовых уровней по сравнению с другими квантово-механическими подходами; в) сложность или недостаточная точность существующих численных алгоритмов для учета многочастичных квантовых эффектов. Решение каждого из этих вопросов обсуждается в соответствующем разделе данной главы.

5.1. Ограничение ширины волновых пакетов

5.1.1. Анализ проблемы неограниченного расширения волновых пакетов со временем

Краткое описание базовой реализации метода МДВП для неидеальной плазмы [510] приведено в разделе 1.3.6. Этот метод основан на представлении волновой электрона $\varphi(\mathbf{x})$ в виде гауссовского волнового пакета (1.41). Многоэлектронная волновая функция $\Psi(\{\mathbf{x}_k\})$ может быть задана либо в приближении Хартри (1.42), либо в “неограниченном” приближении Хартри-Фока (Unrestricted Hartree-Fock, UHF) с антисимметризацией волновых функций электронов, имеющих одинаковую проекцию спина на ось z (1.46). Второй вариант представления волновой

функции для краткости будем называть далее “приближением Хартри-Фока”, а метод на его основе — МДВПА. Ионы в обоих случаях считаются классическими частицами, спиновая динамика электронов не учитывается.

Запишем полный гамильтониан системы в операторной форме

$$\hat{H}_{\text{wpmd}} = \sum_k^{N_e} \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m_e} - \sum_{k,j}^{N_e, N_i} \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{r}}_k - \mathbf{R}_j|} + \sum_{k<l}^{N_e, N_e} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_k - \hat{\mathbf{r}}_l|} + K_i + U_{ii} + U_{\text{ext}}, \quad (5.1)$$

где $\hat{\mathbf{r}}_k$ и $\hat{\mathbf{p}}_k$ — операторы координаты и импульса для электрона с номером k , \mathbf{R}_j — координата иона j , K_i — полная кинетическая энергия ионов, считающихся классическими частицами (1.27), U_{ii} — кулоновская энергия ион–ионного взаимодействия (1.28), U_{ext} — потенциал внешних сил (1.26).

В приближении Хартри классическая функция Гамильтона для параметров волновых пакетов $H_{\text{wpmd}} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ может быть получена путем вычисления соответствующих интегралов

$$H_{\text{wpmd}} = K_e^{\text{wpmd}} + U_e^{\text{wpmd}} + U_{ee}^{\text{wpmd}} + U_{ei}^{\text{wpmd}} + K_i + U_{ii} + U_{\text{ext}}, \quad (5.2)$$

$$K_e^{\text{wpmd}} = \sum_{k=1}^{N_e} \left(\frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_e} + \frac{p_{sk}^2}{2m_e} \right), \quad (5.3)$$

$$U_e^{\text{wpmd}} = \sum_{k=1}^{N_e} \frac{9\hbar^2}{8m_e s_k^2}, \quad (5.4)$$

$$U_{ee}^{\text{wpmd}} = \sum_{k=1}^{N_e} \sum_{l<k}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{3}|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|}{\sqrt{2}(s_k^2 + s_l^2)} \right), \quad (5.5)$$

$$U_{ei}^{\text{wpmd}} = - \sum_{k=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_i} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_j|} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{3}|\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_j|}{\sqrt{2}s_k} \right), \quad (5.6)$$

где $\mathbf{q} = \{\mathbf{r}_k(t), s_k(t), \mathbf{p}_k(t), p_{sk}(t)\}$ — набор параметров волновых пакетов для электрона k . С точки зрения квантовой механики энергия U_e^{wpmd} должна быть отнесена к кинетической энергии электрона K_e^{wpmd} . Если же рассматривать систему волновых пакетов как классическую систему материальных точек с дополнительными динамическими переменными (степенями свободы) s_k , то эта часть энергии, зависящая от координат, должна быть отнесена к потенциальной энергии.

Из приведенных выражений следует, что потенциальные энергии e - e и e - i взаимодействия U_{ee}^{wpmd} и U_{ei}^{wpmd} имеют такой же вид, как и в классической МД при использовании псевдопотенциала (1.20). Отличие состоит лишь в том, что для классической МД параметры λ_{ei} и λ_{ee} фиксированы, а для МДВП они являются динамическими переменными и зависят от ширин взаимодействующих пакетов.

Динамика волновых пакетов, следующая из уравнения Шредингера или вариационного принципа (1.43), в приближении Хартри описывается уравнениями (1.44). В приближении Хартри-Фока необходимо решать более сложные уравнения, включающие обратную норм-матрицу (1.48). Алгоритм Монте-Карло для волновых пакетов (МКВП) строится обычно на основе изменения полной энергии H_{wpmd} .

Для примера рассмотрим потенциальную энергию взаимодействия одного волнового пакета с ионом $U(r, s) = U_{ee}^{\text{wpmd}}(r, s) + U_e^{\text{wpmd}}(s)$, показанную на рисунке 5.1. Эта система является упрощенной моделью атома водорода. Наличие у волнового пакета ненулевой ширины $s > 0$ делает потенциальную энергию конечной при $r \rightarrow 0$. Это позволяет в отличие от классической МД не использовать псевдопотенциалы для отсечки взаимодействия на близких расстояниях (см. раздел 1.2.2), хотя полученный минимум энергии, как было отмечено ранее, не вполне совпадает с энергией основного состояния атома водорода. Использование более точной параметризации волновой функции электрона для улучшения этого результата обсуждается в разделе 5.2.

Из рисунка 5.1 также видно, что финитное движение электрона с ненулевой кинетической энергией возможно лишь в небольшой области вблизи иона. Из-за дополнительной энергии U_e^{wpmd} ширина волнового пакета для электрона, слабо связанного с ионом, начинает неограниченно возрастать, как показано на рисунке 5.2а. Поскольку ширина волнового пакета не ограничивается размерами расчетной ячейки, при $s > L$ электрон оказывается делокализованным и фактически перестает взаимодействовать с другими частицами вследствие множителя $\text{erf}(r/s)$ в энергии взаимодействия (5.5) – (5.6).

Таким образом, если плотность плазмы недостаточно велика для того, чтобы электроны постоянно находились в области сильного взаимодействия с ионами, в процессе моделирования методом МДВП однородной плазмы с применением ПГУ

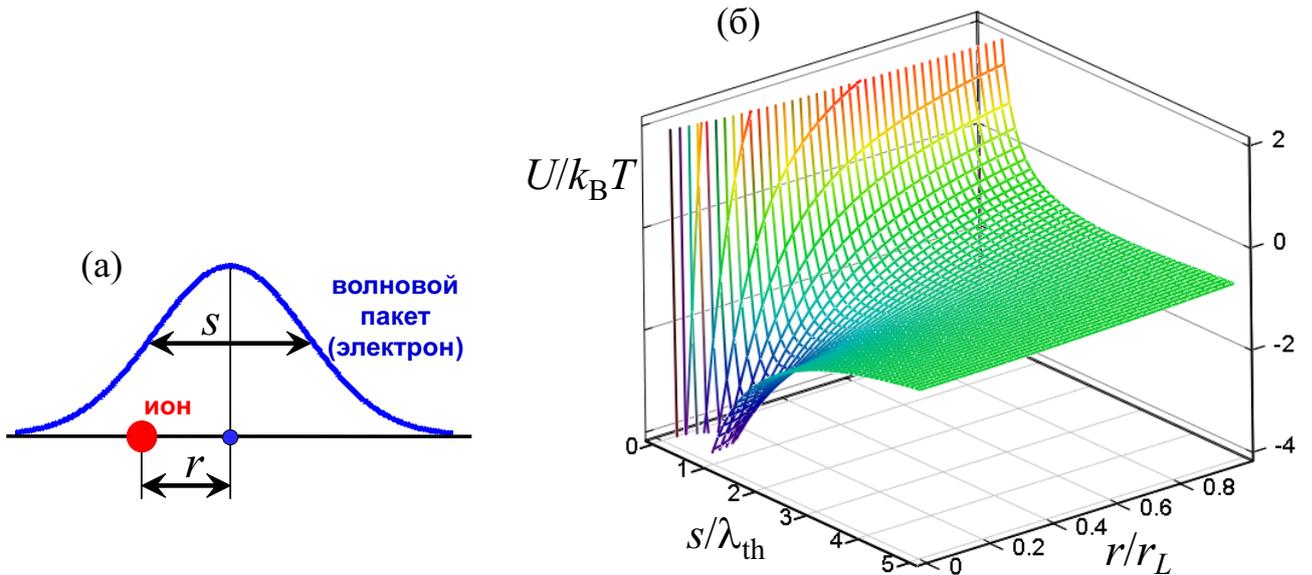


Рис. 5.1. Взаимодействие иона с волновым пакетом (модельный атом водорода): (а) схематичное изображение системы, (б) зависимость потенциальной энергии взаимодействия от ширины пакета s и расстояния между ионом и центром пакета r ; $r_L = Ze^2/(k_B T)$, $\lambda_{th} = \hbar/\sqrt{m_e k_B T} = \lambda_e/\sqrt{2\pi}$.

в системе начинают накапливаться электроны, “расплывшиеся” по всей расчетной ячейке и не взаимодействующие с другими частицами. С одной стороны, этот эффект соответствует принципу неопределенности Гейзенберга, но с точки зрения построения численного алгоритма он приводит к снижению фактической средней концентрации электронов в плазме.

При увеличении плотности (степени неидеальности) плазмы этот эффект становится меньше. Так, например, на рисунке 5.2б показано распределение волновых пакетов по параметру s для различных значений Γ . Из рисунка видно, что при $\Gamma = 2$ большинство волновых пакетов локализованы, тогда как при $\Gamma = 0.5$ расплывание оказывается очень существенными и модель МДВП не вполне адекватно описывает заданную систему. Схожие результаты были получены в [505].

В [522] указывается, что переход к приближению Хартри-Фока и антисимметризация многоэлектронной волновой функции частично решают проблему расплывания пакетов. Это связано с перекрытием волновых пакетов и появлением обменного взаимодействия, стремящегося уменьшить их ширину при той же концентрации электронов. Однако, в этой работе представлены результаты лишь для температур $T < 5000$ К и концентраций электронов близких к 10^{23} см $^{-3}$. Расчеты методом МКВП с антисимметризацией (МКВПА), проведенные в настоящей

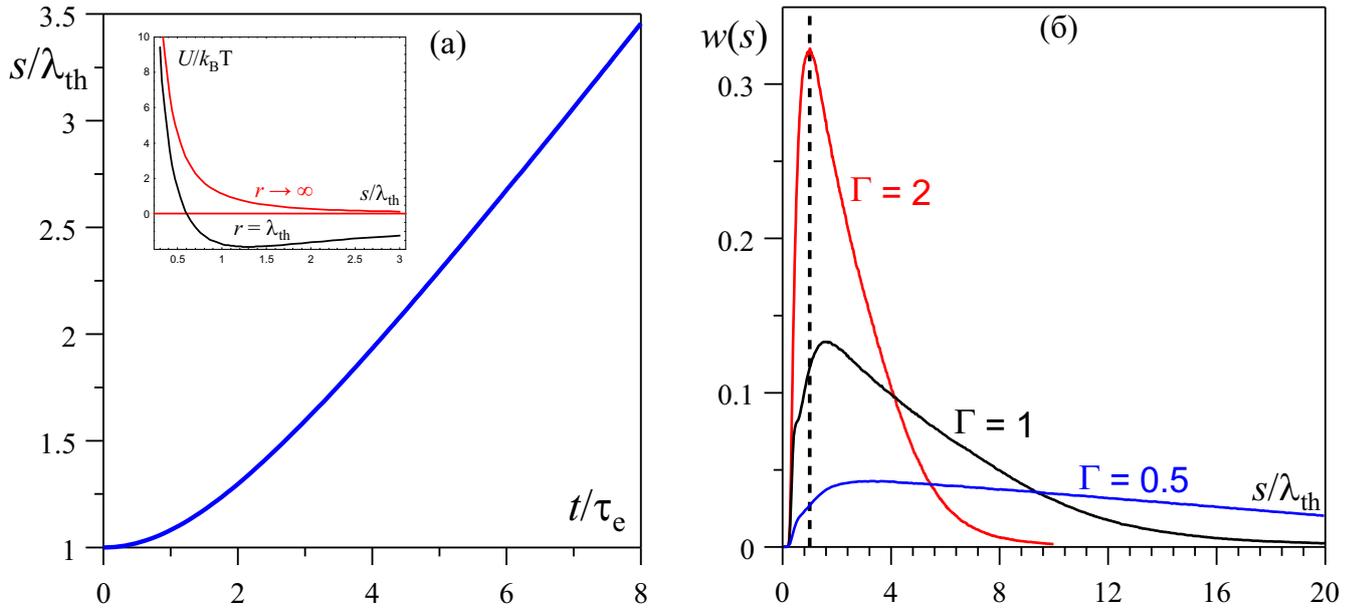


Рис. 5.2. (а) Зависимость ширины волнового пакета для свободного электрона от времени; на вставке показана потенциальная энергия системы электрон–ион в зависимости от ширины пакета s для связанного $r = \lambda_{\text{th}}$ и свободного $r \rightarrow \infty$ электронов. (б) Распределение ширин волновых пакетов для различных значений параметра неидеальности (значения Γ указаны на графике), $T_e = 3 \cdot 10^4$ К.

работе, показали, что для при более низких концентрациях и более высоких температурах плазмы проблема расплывания волновых пакетов сохраняется и при использовании приближения Хартри-Фока (таблица 5.1). Как видно из таблицы, для температуры $T \geq 3 \cdot 10^4$ К устойчивых распределений ширин пакетов получить не удалось.

Таблица 5.1. Средняя ширина волновых пакетов, полученная с помощью моделирования методом Монте-Карло в приближении Хартри-Фока с антисимметризацией волновых пакетов (МКВПА), для различной концентрации электронов и температуры плазмы. Начальное состояние соответствует молекулярному газу H_2 . Прочерки соответствуют тем случаям, когда наблюдалось расплывание волновых пакетов за границу расчетной ячейки, пустые ячейки — отсутствию данных.

$n_e, 10^{21} \text{ см}^{-3}$	$T, 10^3 \text{ К}$							
	1	4	6	8	10	12	15	30
2	0.873	–			–		–	–
20	0.867	1.168			–		–	–
200		0.724	0.751	0.761	0.788	0.841	>1	–

Наиболее простое решение данной проблемы пакетов было предложено в [516]. Оно состоит в добавлении гармонического члена к энергии волнового

пакета U_e^{wpmd} , в результате чего она принимает вид

$$U_e^{\text{wpmd,c}} = \sum_{k=1}^{N_e} \frac{9\hbar^2}{8m_e} \left(\frac{s_0^2}{s_k^2} + \frac{s_k^2}{s_0^2} \right), \quad (5.7)$$

Величина s_0 является параметром модели, который выбирается, исходя из априорных предположений о средней ширине волнового пакета в плазме. В [518] и расчетах, описанных ниже, этот параметр полагается равным $s_0 = 0.64\lambda_{\text{th}}$.

Для определения степени применимости этого подхода в настоящей работе проведен анализ влияния параметра s_0 на результаты расчета динамической проводимости плазмы $\sigma(\omega)$ и эффективной частоты столкновений $\nu(\omega)$, которые определялись из Фурье преобразования автокоррелятора тока (2.6) по формулам (2.30) и (2.15). Для расчета АФТ использовались скорости \mathbf{p}_k/m_e , представляющие собой квантовое среднее для соответствующего оператора импульса электрона.

На рисунке 5.3 представлен результат вычисления действительной части $\nu(\omega)$ для различных значений s_0/λ_{th} . Для сравнения приведены также результаты расчетов классической МД с псевдопотенциалом Кельбга (1.18) (см. раздел 2.3). Из рисунка видно, что результат моделирования сильно зависит от выбора параметра s_0 . Это возвращает нас к проблеме зависимости результатов расчета от вида псевдопотенциала и температуры среды, обсуждавшихся для классической МД, в то время как МДВП была призвана разрешить эту проблему.

5.1.2. Ограничение ширины пакета, основанное на энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом

В настоящей работе было рассмотрено несколько альтернативных решений проблемы расплывания волновых пакетов. Во всех случаях гамильтониан (5.2) для большинства частиц оставался без изменений. Первое и наиболее простое решение было основано на том, что ширина пакета не может превышать половины длины ребра основной МД ячейки $L/2$. Для пакетов, которые не удовлетворяли этому условию $s > s_{\text{max}} = L/2$, выполнялась замена $s \rightarrow L - s$, которая означала фактически “отражение” параметра s от границы $L/2$, как это происходит с координатой при использовании отражающих граничных условий (см. раздел 2.4). В этом слу-

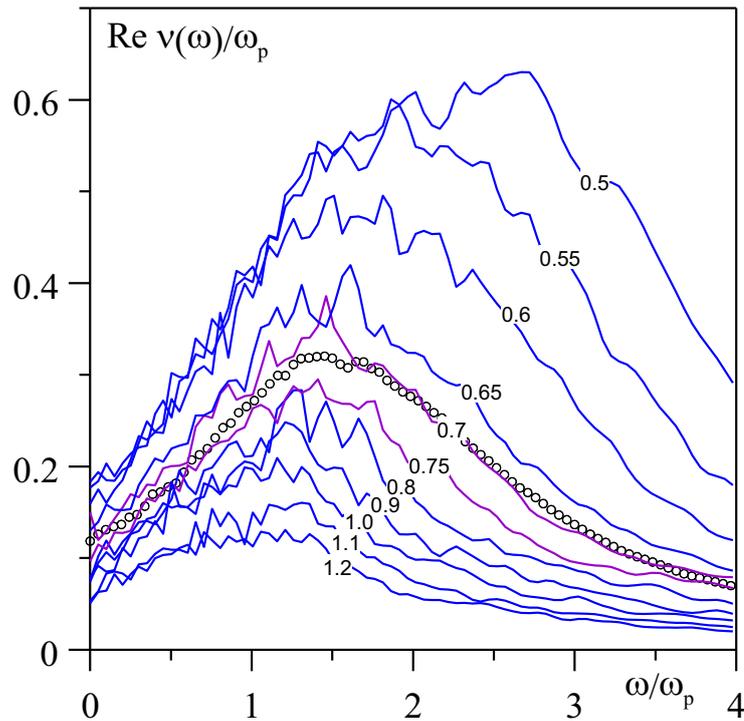


Рис. 5.3. Действительная часть эффективной частоты столкновений в зависимости от частоты возмущающего поля. Сплошные кривые — расчет методом МДВП с ограничением ширины волновых пакетов (значения параметра s_0/λ_{th} указаны на кривых), кружки — расчет методом классической МД с модифицированным потенциалом Кельбга (1.18). Параметры плазмы: $\Gamma = 1$, $T_e = 1.35 \cdot 10^5$ К.

чае удавалось избежать неограниченного роста ширины волновых пакетов, однако средняя ширина волновых пакетов оставалась еще слишком большой при умеренных значениях Γ (таблица 5.2 и кривые 3, 4 на рисунке 5.4), что приводило к занижению энергии взаимодействия электронов с другими частицами.

Таблица 5.2. Средняя $\langle s \rangle$ максимальная $\max(s)$ ширина волновых пакетов при моделировании без дополнительных ограничений и с ограничением $s \leq s_{max}$ (отражение для ширины пакетов) для плазмы с различной степенью неидеальности Γ .

Γ	без ограничений		с ограничением $s \leq L/2$	
	$\langle s \rangle / \lambda_{th}$	$\max(s) / \lambda_{th}$	$\langle s \rangle / \lambda_{th}$	$\max(s) / \lambda_{th}$
1.0	2.15	1680	1.92	6.61
2.0	1.25	155	1.13	2.94

Второе решение проблемы расплывания основывалось на том, что ограничения ширины должны вводиться только для электронов, которые находятся вне области сильного взаимодействия с ионами и другими электронами и могут считаться “свободными”. Когда же электрон испытывает столкновение с другими частицами, его динамика, определяемая исходным гамильтонианом (5.2), должна

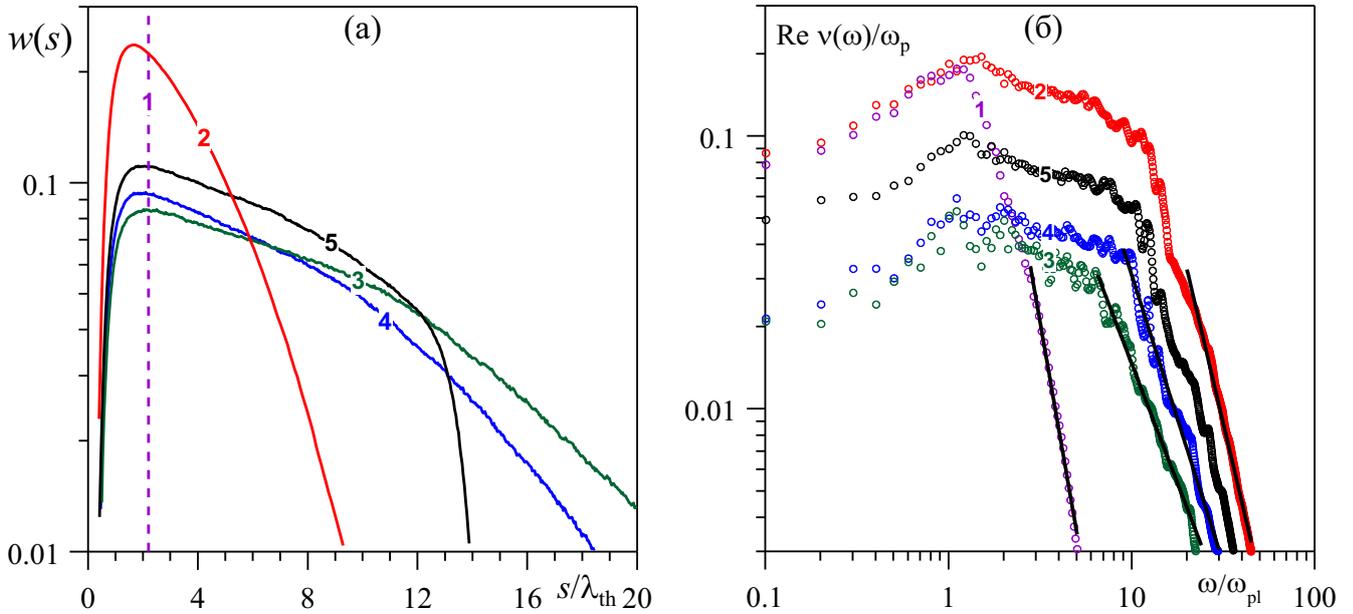


Рис. 5.4. Распределение ширины волновых пакетов (а) и действительная часть эффективной частоты столкновений (б) для различных способов ограничения s : 1 — ширина всех пакетов фиксирована на значении $s = 2.2\lambda_{th}$, 2 — ограничение с помощью гармонического члена (5.7) с $s_0 = 0.64\lambda_{th}$, 3 — без ограничения ширины пакетов, 4 — ограничение ширины на уровне $s_0 \leq s_{max} = L/2$ ($s_{max} = \lambda_{th}$ для $\Gamma = 1$), 5 — ограничение по энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом $U_0 = 0.4k_B T$. Прямые линии показывают высокочастотную асимптотику. Параметры плазмы: $\Gamma = 1$, $T_e = 3 \cdot 10^4$ К.

оставаться без изменений. Приведенные выше результаты показывают, что данном случае ширина пакета ограничивается естественным образом. Преимущество данного подхода состоит в том, что он позволяет избежать расплывания пакетов, не искажая процесс близких столкновений частиц, где динамическое изменение ширины пакета играет важную роль. В целом этот подход находится в русле более общей идеи об использовании разных моделей взаимодействия для электронов, находящихся в области слабого и сильного взаимодействия с другими частицами, с плавным переключением между ними [549].

Критерием того, считать ли электрон свободным, была выбрана энергия его взаимодействия с ближайшим ионом U_{ei}^{near} . Если эта величина превышала некоторое пороговое значение U_0 , то электрон считался покинувшим область сильного взаимодействия и его ширина пакета ограничивалась на том уровне, который она имела в момент пересечения порога U_0 . Фактически это ограничение было реализовано путем добавления в энергию U_e^{wpmnd} дополнительного члена $\Delta H_e = A(s(t) - s(t_0))^6 \Theta(s(t) - s(t_0))$, где t_0 — момент времени, в который электрон выходит из области сильного взаимодействия, A — некоторый размерный

коэффициент, Θ — функций Хевисайда. После того, как энергия U_{ei}^{near} снова снижалась до уровня U_0 , ограничение на ширину пакета снималось.

На рисунке 5.5а показан пример зависимости энергии U_{ei}^{near} для электрона в плазме от времени без и с применением указанного ограничения. В первом случае (красная кривая) энергия взаимодействия растет почти до нуля из-за неограниченного расплывания пакета. Такие электроны, как правило, перестают взаимодействовать с другими частицами. В втором случае (синяя кривая) видно, что частица продолжает испытывать периодические столкновения с ионами.

На рисунке 5.5б показан результат расчета величины $\text{Re } \nu(\omega)$ для различных значений параметра U_0 (общего для всех электронов). В отличие от обсуждавшегося выше параметра s_0 (см. рисунок 5.3) здесь видна область ($U_0 < 0.4k_B T$), где результат практически не зависит от выбора U_0 , т.е. данная модель не нуждается в априорном предположении о средней ширине пакета.

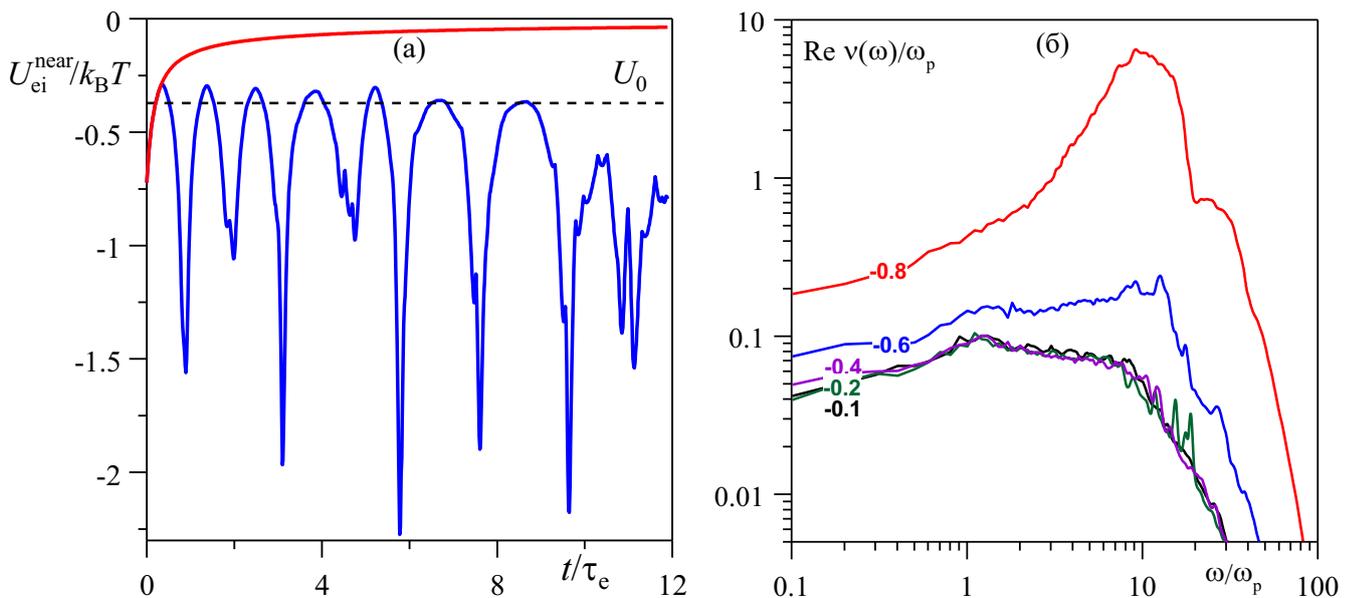


Рис. 5.5. (а) Зависимость энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом от времени: верхняя (красная) кривая — без ограничения, нижняя (синяя) — с ограничением по уровню U_0 (уровень U_0 показан пунктиром). (б) Действительная часть эффективной частоты столкновений при ограничении ширины волновых пакетов по различным уровням энергии U_0 (значения $U_0/k_B T$ указаны на кривых). Параметры плазмы: $\Gamma = 1$, $T_e = 3 \cdot 10^4$ К.

Подведем промежуточный итог и рассмотрим результат применения изложенных выше методов ограничения ширины волновых пакетов. На рисунках 5.4 – 5.6 показаны распределения ширин волновых пакетов и соответствующие им результаты расчета эффективной частоты столкновений для различных методов

ограничения s . Из рисунка 5.4а видно, что при отсутствии ограничений (кривая 3) или при ограничении ширины по половине длине ячейки $s_0 \leq s_{\max} = L/2$ (кривая 4) в системе присутствует достаточно много “расплывшихся” пакетов с $s > 15\lambda_{\text{th}}$. Наименьшая средняя ширина пакетов достигается при использовании ограничения, предложенного в (5.7) (кривая 2), однако, как было показано выше, это существенным образом влияет на характер электрон–ионных столкновений, искажая результат моделирования.

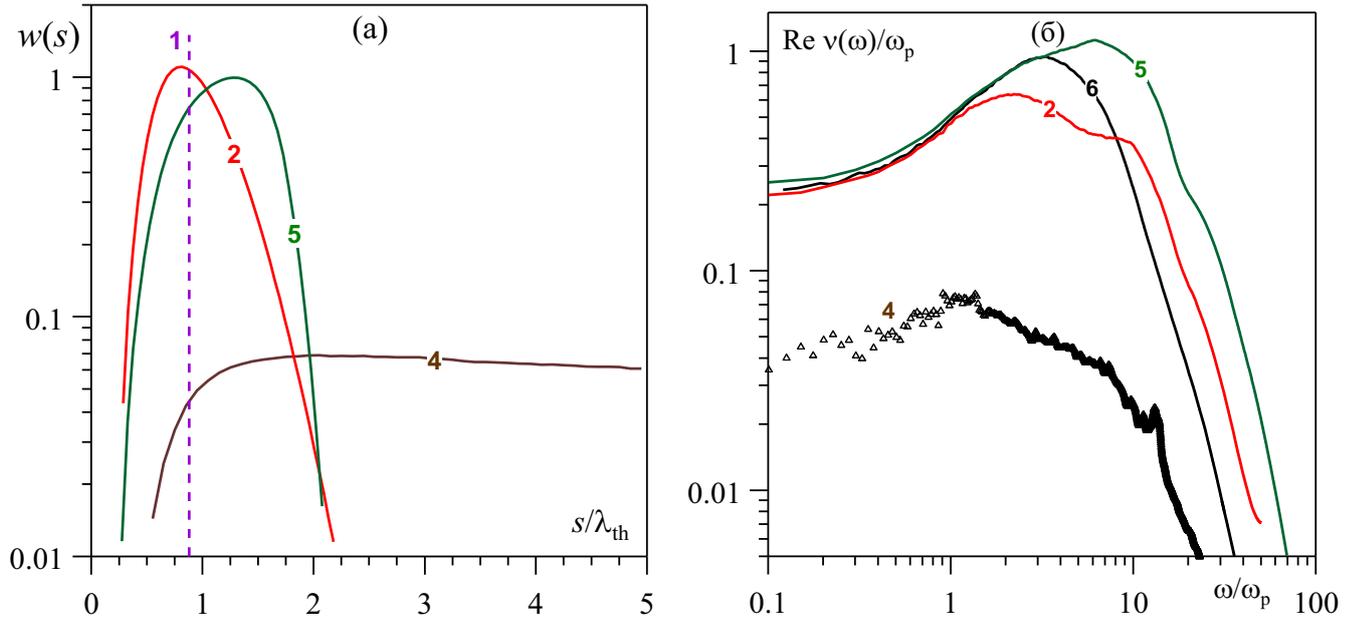


Рис. 5.6. Распределение ширины волновых пакетов (а) и действительная часть эффективной частоты столкновений (б) для различных способов ограничения s . Обозначения кривых 1, 2, 4 и 5 соответствуют рисунку 5.4; кривая 6 на рисунке (б) — классическая МД с потенциалом (1.18). Параметры ограничения ширины пакетов: $s_0/\lambda_{\text{th}} = 0.88$, $U_0/k_B T = -5$, параметры плазмы: $\Gamma = 1$, $T_e = 1.35 \cdot 10^5$ К.

Предложенный метод ограничения по энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом, с одной стороны, не искажает динамику электронов в области сильного взаимодействия, так как полученное распределение (кривая 5) при $s < 10\lambda_{\text{th}}$ достаточно близко к распределению, полученному без ограничений (кривая 3). С другой стороны, этот метод не позволяет электронам, выходящим из области сильного взаимодействия, иметь неограниченно “расплывающиеся” пакеты, что приводит к резкому спаду $w(s)$ при $s \approx 12\lambda_{\text{th}}$. Этот метод также имеет свободный параметр U_0 , однако выбор этого параметра может быть в большей степени физически обоснован, чем выбор s_0 . Кроме того, существует область значений U_0 , где результаты для эффективной частоты столкновений слабо зависят

от его выбора.

Рисунок 5.6а отличается другой температурой плазмы, а также тем, что параметры ограничения ширины пакетов s_0 и U_0 были специально подобраны для соответствия проведенным ранее расчетам классической МД с модифицированным псевдопотенциалом Кельбга (1.18) (см. раздел 2.3) по значению статического предела $\nu(\omega = 0)$.

На рисунках 5.4б и 5.6б представлены результаты расчета $\text{Re } \nu(\omega)$ для тех же основных способов ограничения ширины пакетов. Моделирование с постоянной шириной пакетов (кривая 1 на рисунке 5.6б) фактически соответствует классической МД с потенциалом (1.20). Из рисунка видно, что эта кривая сильно отличается от остального массива кривых в области высоких частот. По абсолютной величине наибольшая частота столкновений на рисунке 5.4б наблюдается для ограничения с помощью дополнительного гармонического потенциала (5.7) (кривая 2), а наименьшая — при отсутствии ограничений или ограничению по критерию $s_0 \leq s_{\max}$, что связано со значительным расплыванием пакетов и снижением эффективной концентрации зарядов (кривые 3 и 4). В этом смысле предложенное ограничение по энергии взаимодействия (кривая 5) выглядит наиболее оптимальным вариантом.

На рисунке 5.6б для сравнения добавлен результат расчета с модифицированным псевдопотенциалом Кельбга (кривая 6). Видно, что с выбранными значениями s_0 и U_0 результаты для $\text{Re } \nu(\omega)$ хорошо совпадают в низкочастотной области $\omega \lesssim \omega_p$, хотя для высокочастотной области наблюдаются заметные отличия. Выбранное значение $U_0/k_B T = -5$ оказалось, очевидно, завешенным по модулю, в результате чего распределение ширин пакетов для метода ограничения по энергии оказалось слишком узким. Таким образом, данный способ определения параметра U_0 , по-видимому, не вполне корректен, хотя в целом метод ограничения по энергии подтвердил свою эффективность.

5.1.3. Использование отражающих граничных условий

Как было показано в предыдущем подразделе, проблема неограниченного возрастания ширины волновых пакетов может быть решена несколькими способа-

ми, однако все они так или иначе подразумевают использование дополнительных параметров, заметно влияющих на результаты моделирования. Напомним, что исходная модель МДВП лишена каких-либо подгоночных параметров, кроме самой формы волнового пакета, и в этом видится ее существенное преимущество перед классической МД с использованием псевдопотенциалов.

С другой стороны, расплывание волновых пакетов напрямую связано с использованием периодических граничных условий, так как формально электрон вне области сильного взаимодействия с ионами не является локализованным. Поэтому в данном подразделе мы рассмотрим вопрос применения отражающих граничных условий, которые естественным образом локализуют волновую функцию электрона в определенной области пространства. Отметим, что в отличие от рассмотренного выше метода ограничения ширины, граничные условия в данном случае вводятся для всей волновой функции, то есть в оператор энергии (5.1) добавляется соответствующая энергия U_{ext} взаимодействия электронов со стенками.

Несмотря на некоторую искусственность данной модели, она представляет интерес не только как технический прием ограничения ширины пакетов для моделирования однородной плазмы, но и в качестве основы для моделирования наноразмерных систем, в которых частицы удерживаются в некотором объеме внешним полем. Примерами таких систем являются кластерная наноплазма, рассмотренная в главе 4, или плазма внутри трека тяжелого иона, рассмотренная в разделе 3.3, где электроны удерживаются в сферической или цилиндрической области полем ионизованных ионов.

Отражающие граничные условия для классической МД были подробно рассмотрены в раздел 2.4. Для проверки влияния граничных условий на распределение волновых пакетов, рассмотрим для начала модельную задачу о распределении нескольких взаимодействующих волновых пакетов в простом ограничивающем потенциале — гармонической ловушке (2.33). Энергия взаимодействия пакетов со стенкой определяется в этом случае как $U_{\text{ext}} = \langle \Psi | \hat{V}_{\text{wall}} | \Psi \rangle$, где \hat{V}_{wall} имеет вид (2.33) для каждой из осей. В случае гауссовского волнового пакета матричные элементы $\langle \varphi_k | \hat{V}_{\text{wall}} | \varphi_l \rangle$ могут быть вычислены аналитически.

Следует отметить, что при $L = 0$ указанная модельная система представляет собой ансамбль фермионов в поле гармонического осциллятора, для которого из-

вестны аналитические решения. Напротив, при больших значения L и достаточно резкой границе ячейки данная система моделирует однородный электронный газ, для которого также существуют аналитические модели.

В тестовых расчетах использовалась система нескольких волновых пакетов в потенциальной ловушке разной пространственной размерности. Ионы в системе отсутствовали, а заряд для волновых пакетов q_e , определяющий взаимодействие частиц, варьировался. Модель позволяет выбирать свойства квантовой симметрии частиц: различимые частицы описываются методом МДВП в приближении Хартри (1.42), фермионы — методом МДВПА в приближении Хартри-Фока (1.46).

Распределения суммарной плотности $\langle \Psi | \Psi \rangle$ в ограниченной трехмерной системе из четырех пакетов для каждого из указанных типов статистики приведены на рисунке 5.7. Распределения приведены вдоль оси x , проинтегрированы по осям y и z , а также усреднены по времени. Параметр ограничивающего потенциала выбран таким образом, что энергия основного состояния для одного волнового пакета в ловушке составляет 11.43 эВ (в модельном атоме водорода эта энергия равна 11.55 эВ), заряд одного пакета составлял $q_e = 0.2e$. Из рисунка видно, что во всех случаях частицы локализованы, однако для приближения Хартри присутствует только один максимум плотности в центре, а для приближения Хартри-Фока обменное взаимодействие приводит к расталкиванию частиц и фактической кристаллизации системы (рисунок 5.7б). Здесь также видно, что особенностью применения граничных условий в методе МДВП является более плавное спадание средней электронной плотности при приближении к отражающей границе ячейки, т.е. ширина приповерхностного слоя оказывается большей, чем для классической МД (см. для сравнения рисунок 2.16). Это вполне объяснимо, так как волновой пакет имеет ненулевую ширину и испытывает воздействие потенциала стенки на расстоянии порядка s от границы ячейки по сравнению с точечной частицей в МД, на которую потенциал стенки действует только при ее выходе за границу.

На рисунке 5.8 показаны средние числа заполнения уровней квантового одномерного осциллятора для системы 4-х волновых пакетов с различной статистикой. Энергия взаимодействия между электронами выбиралась малой $q_e = 0.04e$ для обеспечения вывода системы на равновесие без сильного изменения собственных состояний в ограничивающем потенциале. Расчет проводился как алгоритмом

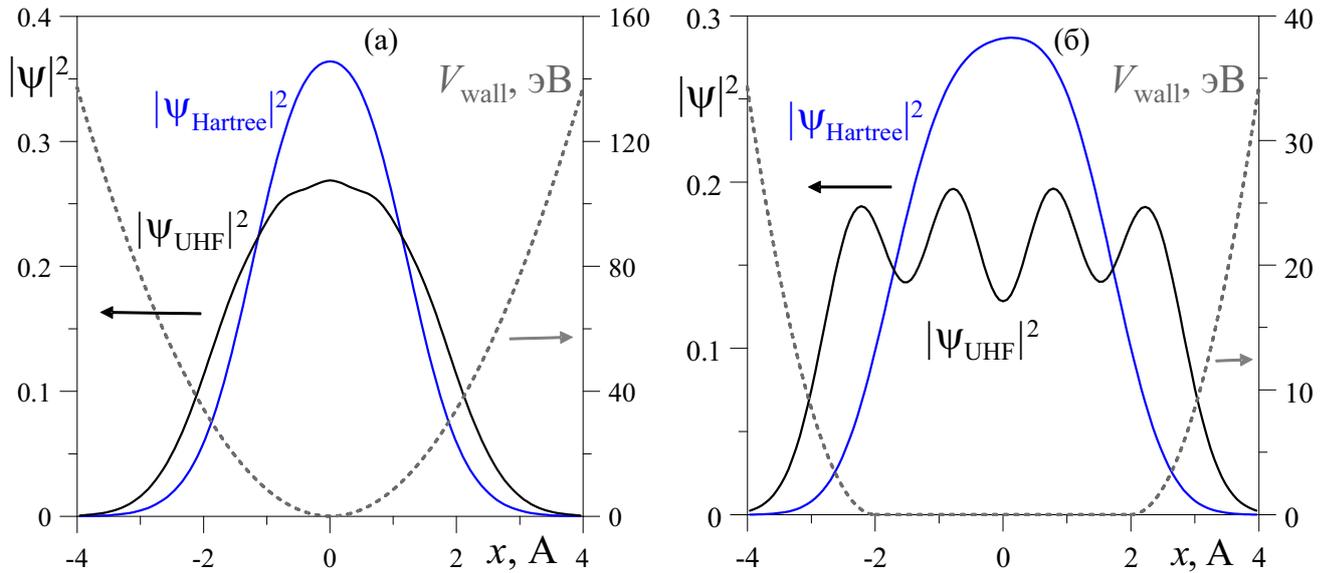


Рис. 5.7. Ограничивающий потенциал V_{wall} (пунктир, правая ось) и среднее распределение электронной плотности вдоль оси x для системы из 4-х волновых пакетов для различного типа статистики (левая ось): синяя линия — метод Хартри Ψ_{Hartree} , черная линия — метод Хартри-Фока Ψ_{UHF} . На рисунке (а) использован гармонический потенциал ($L = 0$), на рисунке (б) — потенциал с плато в центре ячейки ($L = 4 \text{ \AA}$).

динамики пакетов, так и методом Монте-Карло (МКВП).

Приведенные результаты показывают, что для ограниченных систем методы МДВП/МДВПА хорошо воспроизводят термодинамику и квантово-статистические свойства системы фермионов, таким образом, использованный тип граничных условий может применяться для ограничения расплывания волновых пакетов в плазме. При этом необходимо учитывать влияние граничных условий, как это было сделано для метода классической МД (см. раздел 2.4).

Обратимся теперь к результатам для водородной плазмы. На рисунке 5.9 показаны примеры установившегося профиля электронной плотности, полученного усреднением по времени для равновесной траектории, в системах с различной средней концентрацией и числом электронов. Данные результаты получены модифицированным методом МДВП-ФП, о котором пойдет речь в разделе 5.3, однако принципиального отличия между МДВП-ФП и МДВП в отношении влияния граничных условий нет, и данные результаты являются общими для всего семейства методов МДВП.

Из рисунка 5.9а видно, что при относительно малых значениях n_e в центре ячейки находится пространственно однородный слой плазмы. Ширина приповерхностного слоя остается практически постоянной при изменении размеров систе-

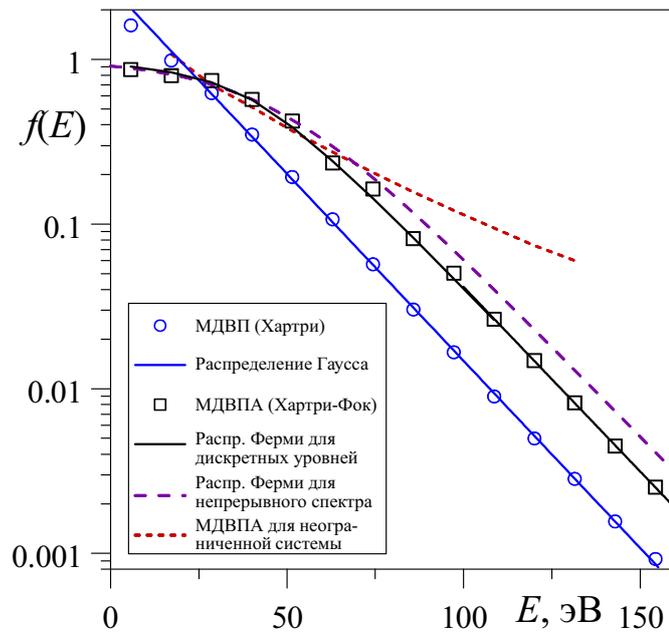


Рис. 5.8. Средние числа заполнения уровней квантового одномерного осциллятора для системы из 4-х волновых пакетов при температуре $T = 20$ эВ: кружки — метод МДВП, квадраты — метод МДВПА, сплошная синяя линия — распределение Гаусса, сплошная синяя линия — распределения Ферми для системы дискретных уровней осциллятора, фиолетовая пунктирная линия — тоже для непрерывного спектра, красная пунктирная линия — МДВПА для неограниченной системы.

мы, однако в отличие от классической МД этот слой, как было отмечено выше, занимает значительную часть ячейки. Таким образом, для получения однородного слоя плазмы в МДВП требуется большее число частиц в ячейке. Другое следствие этого эффекта заключается в том, что при малом размере системы плазма в центре ячейки сжимается под давлением приповерхностного слоя и средняя концентрация электронов в центральной области оказывается зависящей от полного числа частиц N_e . Предполагаемое среднее значение концентрации N_e/L^3 достигается лишь в пределе $N_e \rightarrow \infty$ (для классической МД этот эффект также присутствует, но он незначителен). Впрочем, для интерпретации результатов моделирования изменение фактической концентрации электронов не представляет серьезной проблемы, если эту величину можно измерить и учитывать наравне с другими выходными характеристиками плазмы.

На рисунке 5.9б показан пример той же системы при значительно большей концентрации зарядов. Поскольку в методе МДВП-ФП учитывается обменное взаимодействие, то, как в случае с модельной системой фермионов в ловушке (рисунки 5.7б), здесь присутствуют осцилляции электронной плотности. В остальном влияние приповерхностного слоя на профиль электронной плотности остается тем

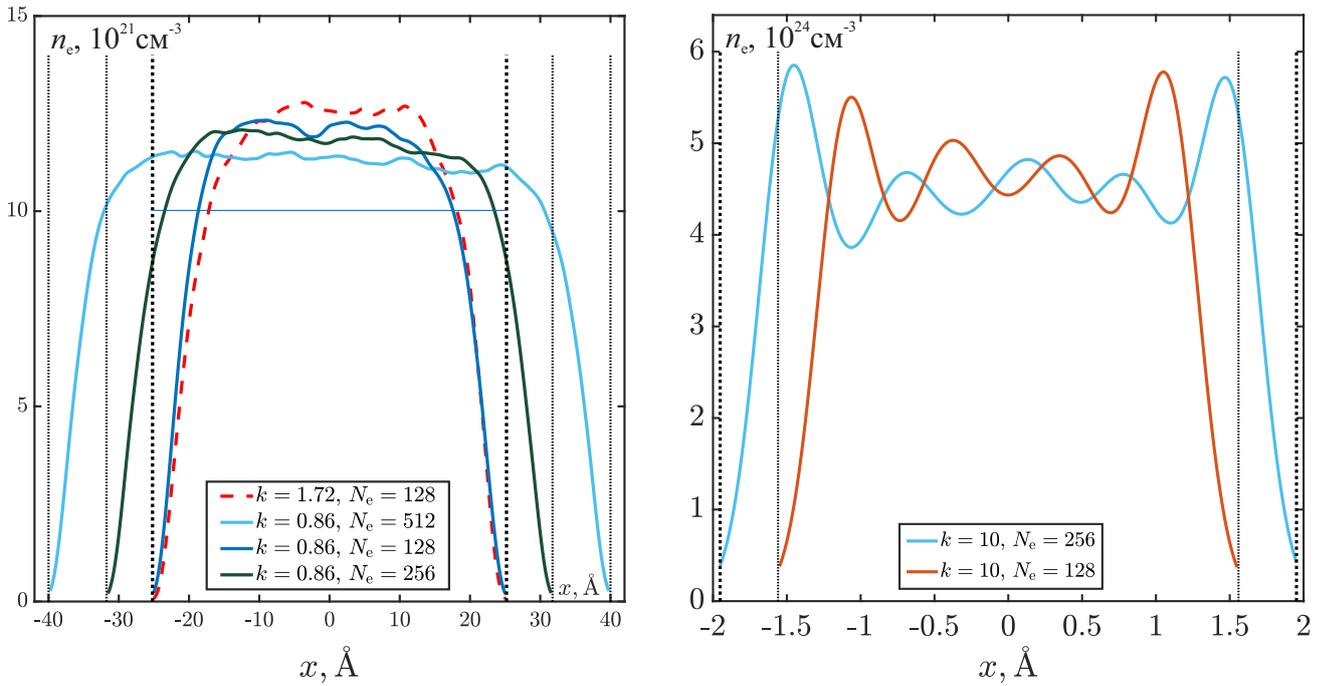


Рис. 5.9. Распределение концентрации плотности вдоль оси x при моделировании неидеальной плазмы водорода со средней концентрацией электронов (а) $n_e = 10^{21} \text{ см}^{-3}$, (б) $n_e = 4.22 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$ методом МДВП-ФП. Линиями различного цвета показаны результаты для разного числа электронов N_e в ячейке (значения N_e указаны на графике); $Z = 1$, $T = 3 \cdot 10^4 \text{ К}$.

же. Зависимость результатов моделирования от параметра отражающего потенциала k и выбор оптимальных значений этого параметра обсуждаются в [538].

5.2. Повышение точности представления волновых функций для связанных состояний электронов и ионов

5.2.1. Представление волновой функции электрона с помощью нескольких волновых пакетов

Оригинальная версия метода МДВП базируется на параметризации одно-электронной волновой функции одним гауссовым волновым пакетом (1.41). Этот метод, как было показано в подразделе 5.1.1, позволяет описывать связанные состояния электронов и ионов, однако точность такого описания квантовых систем невысока. Энергия основного состояния модельного атома водорода, как отмечалось в разделе (1.3.6), составляет -11.55 эВ вместо -13.61 эВ , то же относится и к другим атомам и молекулам. При этом гауссовская форма волнового пакета очень удобна тем, что большинство интегралов для матричных элементов, в том чис-

ле для кулоновского взаимодействия, вычисляется аналитически (см., например, выражения (5.5) – (5.6)).

Повысить точность параметризации волновой функции электрона можно, используя линейную комбинацию из нескольких гауссовых волновых пакетов

$$\begin{aligned}\phi_k(\mathbf{x}) &= n_k^{-1/2} \sum_{\alpha=1}^{M_k} c_{k\alpha} \varphi_{k\alpha}(\mathbf{x}), \\ \varphi_{k\alpha}(\mathbf{x}) &= \left(\frac{3}{2\pi s_{k\alpha}^2} \right)^{3/4} \exp \left[- \left(\frac{3}{4s_{k\alpha}^2} - \frac{ip_{s,k\alpha}}{2\hbar s_{k\alpha}} \right) (\mathbf{x} - \mathbf{r}_{k\alpha})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_{k\alpha} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}_{k\alpha}) \right],\end{aligned}\quad (5.8)$$

где k — номер электрона, α — номер волнового пакета, M_k — количество пакетов на электрон. В дополнение к набору параметров для исходной версии МДВП ($\mathbf{r}_{k\alpha}$, $\mathbf{p}_{k\alpha}$, $s_{k\alpha}$, $p_{s,k\alpha}$) здесь в качестве варьируемых величин добавляются также коэффициенты $c_{k\alpha}$. Нормировка волновой функции для каждого электрона обеспечивается множителем $n_k = \sum_{\alpha,\beta} c_{k\alpha}^* c_{k\beta} o_{k\alpha k\beta}$, где $o_{k\alpha k\beta} = \langle \varphi_{k\alpha} | \varphi_{k\beta} \rangle$ — элемент матрицы перекрытий. Исходная формулировка этого метода принадлежит И.А. Валуеву.

В дальнейшем мы будем называть эту модификацию методом молекулярной динамики с расщепленным волновыми пакетами (МДРВП). К сожалению, в отличие от исходной формы волновой функции (1.41), где нормировка $\phi_k(\mathbf{x})$ сохраняется при любом значении параметров пакета, в методе МДРВП, как и в МДВПА, для обеспечения нормировки необходимо вычисление норм-матрицы, поэтому уравнения эволюции параметров пакетов (аналог уравнений движения) вместо простой симплектической формы (1.44) принимают вид (1.48). С увеличением числа пакетов на электрон возрастает и число параметров волновой функции, что приводит к увеличению норм-матрицы, поэтому этот метод является вычислительно более сложным, чем исходный МДВП. Тем не менее, в некоторых случаях его применение может быть оправдано.

Как и в случае исходного метода МДВП гауссова форма волновых пакетов помогает получить аналитические выражения для матричных элементов гамильтониана (5.2). Для кинетической энергии электронов и электрон–ионного взаимо-

действия имеем

$$\begin{aligned} t_{kl}^e + v_{kl}^{ei} &= \langle \varphi_k | K_e^{\text{wpmd}} + U_e^{\text{wpmd}} + U_{ei}^{\text{wpmd}} | \varphi_l \rangle \\ &= n_k^{-1/2} n_l^{-1/2} \sum_{\alpha, \beta} c_{k\alpha}^* c_{l\beta} (t_{k\alpha l\beta}^e + v_{k\alpha l\beta}^{ei}). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Двухчастичный матричный элемент электрон–электронного взаимодействия имеет вид

$$v_{klmn}^{ee} = \langle \varphi_k \varphi_l | U_{ee}^{\text{wpmd}} | \varphi_m \varphi_n \rangle = (n_k n_l n_m n_n)^{-1/2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} c_{k\alpha}^* c_{l\beta}^* c_{m\gamma} c_{n\delta} v_{k\alpha l\beta m\gamma n\delta}^{ee}. \quad (5.10)$$

Многоэлектронная волновая функция здесь также может быть представлена как в приближении Хартри, так в приближении Хартри-Фока. Для приближения Хартри полная энергия системы имеет довольно простой вид

$$H = \sum_k (t_{kk}^e + t_{kk}^{ei}) + \sum_{k,l} v_{klkl}^{ee} + K_i + U_{ii} + U_{\text{ext}}. \quad (5.11)$$

Норм-матрица \mathbf{N} для метода МДРВП в приближении Хартри имеет блочно–диагональную, где каждый блок соответствует одному электрону, а размеры блока определяются количеством волновых пакетов на электрон. Блок норм-матрицы для k -го электрона имеет вид

$$N_{q_{k\alpha} q_{k\beta}} = -2\hbar \text{Im} \left[\left\langle (\phi_k)'_{q_{k\alpha}} | (\phi_k)'_{q_{k\beta}} \right\rangle - \left\langle (\phi_k)'_{q_{k\alpha}} | \phi_k \right\rangle \left\langle \phi_k | (\phi_k)'_{q_{k\beta}} \right\rangle \right], \quad (5.12)$$

где производные по параметрам волновых пакетов $(\phi_k)'_{q_{k\alpha}}$, как и производные энергии $\partial H / \partial \mathbf{q}$ могут быть вычислены аналитически. Мы не приводим здесь эти выражения из-за их громоздкости.

В случае приближения Хартри-Фока полная энергия имеет вид

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\text{same spin } (k, l)} (n_k n_l)^{-\frac{1}{2}} y_{kl} \sum_{\alpha, \beta} (c_{k\alpha}^* o_{k\alpha l \beta} c_{l\beta}) (t_{k\alpha l \beta}^e + v_{k\alpha l \beta}^{ei}) \\
& + \sum_{\substack{\text{same spin } (k, m), \\ \text{same spin } (l, n)}} (n_k n_l n_m n_n)^{-\frac{1}{2}} y_{mk} y_{nl} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (c_{k\alpha}^* o_{k\alpha m \gamma} c_{m\gamma}) (c_{l\beta}^* o_{l\beta n \delta} c_{n\delta}) v_{k\alpha l \beta m \gamma n \delta}^{ee} \\
& - \sum_{\substack{\text{same spin} \\ (k, l, m, n)}} (n_k n_l n_m n_n)^{-\frac{1}{2}} y_{ml} y_{nk} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (c_{k\alpha}^* o_{k\alpha m \gamma} c_{m\gamma}) (c_{l\beta}^* o_{l\beta n \delta} c_{n\delta}) v_{k\alpha l \beta m \gamma n \delta}^{ee} \\
& + K_i + U_{ii} + U_{\text{ext}}, \tag{5.13}
\end{aligned}$$

где y_{kl} — элементы матрицы Y , представляющей собой обратную матрицу перекрытий $Y = O^{-1}$, $O_{kl} = \sum_{\alpha, \beta} c_{k\alpha}^* o_{k\alpha l \beta} c_{l\beta}$. Матрицы Y и O рассчитывается отдельно для всех электронов с проекцией спина вверх и всех электронов с проекцией спина вниз. Норм-матрица в приближении Хартри-Фока уже не является блок-диагональной.

5.2.2. Энергии основного состояния атомов водорода и гелия

Простейшим примером, демонстрирующим возможности метода МДРВП, является расчет энергий основного состояния простейших атомов — водорода и гелия. На рисунке 5.10а показано, как разница между рассчитанным и точным значением энергии основного состояния для атома водорода экспоненциально убывает с ростом числа волновых пакетов на электрон N_{wp} . Если для обычной МДВП ($N_{\text{wp}} = 1$) эта разница составляет 2.06 эВ, то уже для МДРВП с $N_{\text{wp}} = 3$ она снижается до 0.08 эВ, что составляет всего 0.6 % от точного значения.

Энергия основного состояния атома гелия в пара ($1s^2$, $S = 0$) и орто ($1s2s$, $S = 1$) состояниях вычислялась методом МДРВП в приближении Хартри-Фока с разнонаправленными и сонаправленными проекциями спина электронов, соответственно (рисунок 5.10б). Найденные значения составили -77.87 эВ и -58.8 эВ для $N_{\text{wp}} \geq 5$, что находится в пределах 1.5% от известных экспериментальных значений. Таким образом, оба варианта метода МДРВП дают хорошую сходимость для энергии основных состояний атомов по числу волновых пакетов на электрон.

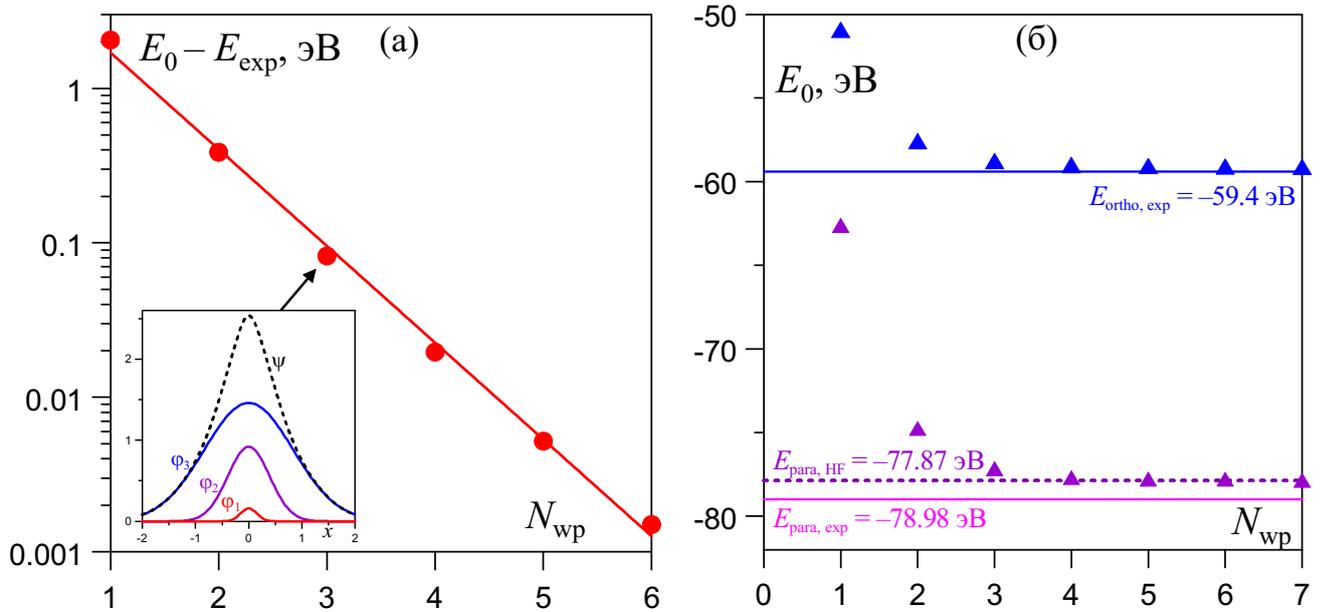


Рис. 5.10. (а) Разница между рассчитанной энергией основного состояния атома водорода и ее точным значением в зависимости от числа волновых пакетов на электрон. На вставке показаны относительные амплитуды и ширины волновых пакетов для $N_{\text{wp}} = 3$. (б) Энергии основного состояния пара- и ортоголия (нижний и верхний набор точек): треугольники и кружки — результаты расчета методом МДРВП, сплошные линии — экспериментальные данные, пунктирная линия — аналитическое значение в приближении Хартри-Фока.

5.2.3. Моделирование туннельной ионизации атома водорода коротким лазерным импульсом

Для проверки возможностей моделирования динамики электрона, представленного несколькими волновыми пакетами, была рассмотрена задача ионизации атома водорода под действием фемтосекундного лазерного импульса. Для сравнения были использованы результаты работы [550], в которой вероятность ионизации этого атома вычислялась двумя способами: путем численного интегрирования временного уравнения Шредингера и с помощью метода Монте-Карло для классических траекторий (МККТ). Электрическое поле линейно поляризованного импульса задавалось как $E_x(t) = E_0 \sin^2[\pi t/(2\tau_L)] \cos(\omega_L t)$, где E_0 — амплитуда поля, $2\tau_L$ — длительность импульса, ω_L — частота лазерного поля. Результаты [550] для скорости ионизации показаны на рисунке 5.11а для двух интенсивностей импульса: $E_0 = 0.33$ ат.ед. (квадраты) и $E_0 = 0.05$ ат.ед. (ромбы)

В данной работе мы повторили расчеты методом МККТ из [550] для обоих значений амплитуды импульса (квадраты и ромбы на рисунке 5.11а). Результаты МККТ для большей амплитуды ближе к соответствующим квантово-механиче-

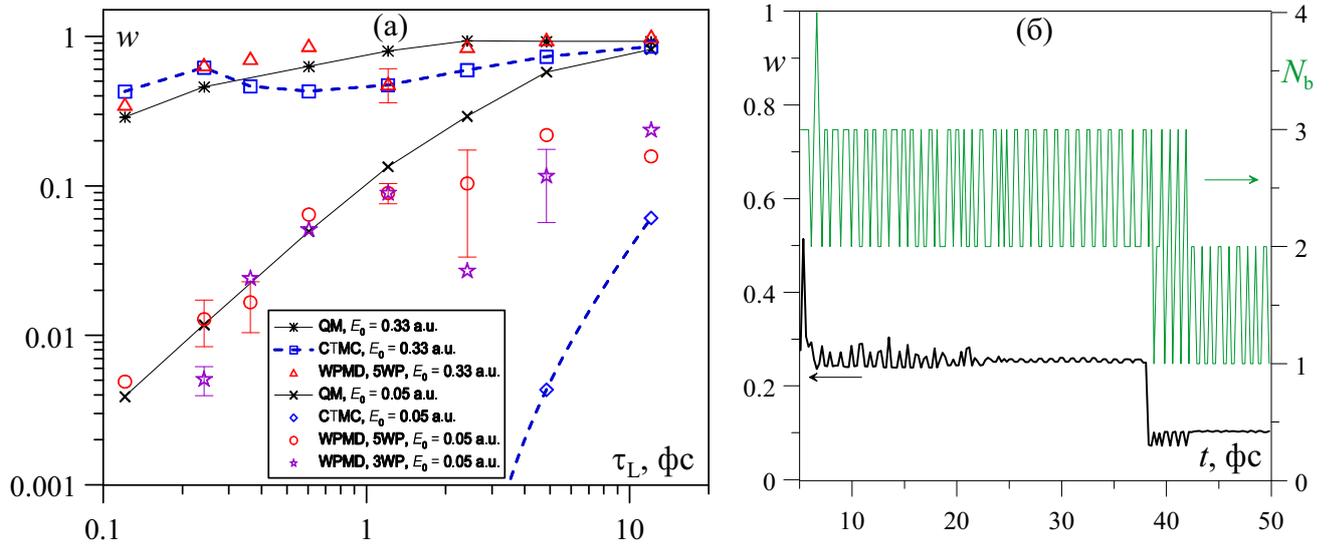


Рис. 5.11. (а) Вероятность ионизации атома водорода в зависимости от длины лазерного импульса для двух различных интенсивностей: $E_0 = 0.33$ ат.ед. (верхний набор точек) и $E_0 = 0.05$ ат.ед. (нижний набор точек). Крестики и звездочки, соединенные сплошными линиями — результаты численного решения уравнения Шредингера [550], квадратики и ромбы, соединенные пунктирными линиями — расчет методом МККТ (данная работа), треугольники и кружки — результат метода МДРВП для $N_{wp} = 5$, пятиконечные звезды — то же для $N_{wp} = 5$. (б) Мгновенное значение вероятности ионизации w (левая ось ординат) и числа связанных волновых пакетов N_b (правая ось ординат) в зависимости от времени в методе МДРВП для импульса с параметрами $\tau_L = 50$ ат.ед. = 1.2 фс, $E_0 = 0.05$ ат.ед.

ским расчетам. Для малой амплитуды МККТ дает заниженные скорости ионизации из-за того, что в нем не учитывается туннельная ионизация.

При моделировании методом МДРВП атом водорода, изначально находившийся в основном состоянии, подвергался воздействию лазерного импульса путем задания внешнего электрического поля $\hat{H}_{\text{ext}} = E_x(t)\hat{x}$ в (5.2). Эволюция во времени основных параметров волновых пакетов для модельной системы с $N_{wp} = 5$ показана на рисунке 5.12. Видно, что ширины трех из пяти волновых пакетов начинают быстро расти, аналогично случаю расплывания пакета для свободного электрона (см. подраздел 5.1.1). Центры этих пакетов удаляются от иона, в отличие от двух других пакетов, которые остаются связанными с ионом. Координаты и ширины пакетов, связанных с ионом, начинают осциллировать.

Для того, чтобы различить свободные и связанные волновые пакеты, можно найти полную энергию каждого из них E_α (рисунок 5.12в) и считать пакеты с отрицательной энергией связанными. При этом волновая функция электрона может

быть условно разделена на свободную и связанную части следующим образом:

$$\Psi = \Psi_{\text{bound}} + \Psi_{\text{free}} = \sum_{\alpha: E_{\alpha} \geq 0} c_{\alpha} \varphi_{\alpha} + \sum_{\alpha: E_{\alpha} < 0} c_{\alpha} \varphi_{\alpha}. \quad (5.14)$$

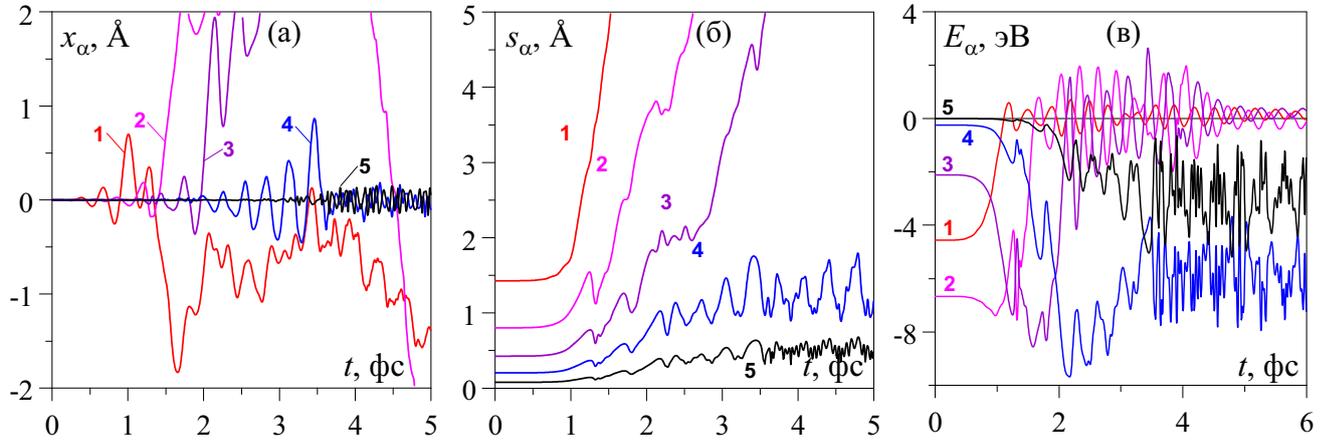


Рис. 5.12. Зависимость параметров волновых пакетов, принадлежащих одному электрону, от времени под действием лазерного импульса: (а) расстояние от центра волнового пакета до иона, (б) ширина пакета, (в) полная энергия пакета. Номера пакетов указаны на кривых. Параметры лазерного импульса: $\tau_L = 1.2$ фс, $E_0 = 0.05$ ат.ед.

Вероятность ионизации атома $w(t)$ может быть определена как отношение норм для волновых функций свободных и всех волновых пакетов $w(t) = \langle \Psi_{\text{free}}(t) | \Psi_{\text{free}}(t) \rangle / \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$. Зависимость этой величины от времени показана на рисунке 5.11б (левая ось). Если проследить за динамикой волновых пакетов в течении достаточно большого промежутка времени, превышающего длительность лазерного импульса (в данном случае ~ 70 фс), то перекрытие свободной и связанной частей волновой функции начинает стремиться к нулю, а функция $w(t)$ выходит на постоянное значение. Эти предельные значения w и представлены на рисунке 5.12а в качестве вероятности ионизации, определенной методом МДРВП.

В некоторых случаях энергии нескольких пакетов продолжают осциллировать вокруг нуля после завершения действия импульса. Это вызывает осцилляции числа связанных пакетов N_b , показанные на рисунке 5.12б (правая ось) и приводит к некоторой статистической ошибке при определении w . Данная ошибка показана на рисунке 5.12а с помощью планок погрешностей.

Как видно из рисунка 5.12а, метод МДРВП существенно увеличивает точность моделирования скорости ионизации для малой амплитуды импульса по

сравнению с классическим методом МККТ. Результаты для коротких импульсов ($\tau_L < 2$ фс) находятся в хорошем согласии с численным решением уравнения Шредингера (крестики). Для более длинных импульсов наблюдается значительное отклонение, вызванное тем, что число связанных пакетов быстро падает до значения $N_b = 1$ уже в процессе ионизации. При этом получившееся локализованное состояние оказывается представленным недостаточно точно для дальнейшей динамики. Та же проблема проявляется при описании очень маленьких скоростей ионизации малым числом N_{wp} , когда ни один из существующих пакетов не может ионизоваться, что приводит к ошибочному результату $w = 0$. Скорее всего, эти проблемы метода могут быть частично устранены введением более точного критерия ионизации, основанного на квантовой проекции волновой функции. За исключением описанных случаев, результаты расчетов показывают, что метод МДРВП дает адекватную модель ионизации связанного электрона фемтосекундным лазерным импульсом, хорошо описывая туннельный эффект в отличие от классического метода МККТ.

5.2.4. Моделирование рассеяния электрона на ансамбле притягивающих центров

Рассмотрим еще одну задачу, иллюстрирующую возможности метода МДРВП. В задаче рассматривается один электрон, представленный несколькими волновыми пакетами, движущийся в периодической ячейке, содержащий 500 протонов (притягивающих центров). Присутствие других электронов в плазме учитывалось введением экранировки потенциала ионов, т.е. заменой кулоновского потенциала электрон-ионного взаимодействия на потенциал Юкавы $V_{ei}^{Yu} = e^2 \exp(-r/r_{scr})/r$ с радиусом экранирования $r_{scr} = 1 \text{ \AA}$. Положения протонов в ячейке определялись на основе предварительного классического МД моделирования равновесной водородной плазмы с температурой $T = 50 \text{ эВ}$ и концентрацией ионов $n_i = 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ($\Gamma = 0.46$, $\theta = 1.37$).

Изначально электрон помещался в центр моделируемой ячейки, а его волновая функция соответствовала гауссовскому волновому пакету с шириной 1.732 \AA . Далее электрону придавался импульс вдоль положительного направления оси x ,

соответствующий кинетической энергии 8.8 эВ, и моделировалось движение электрона в среде неподвижных ионов методом МДРВП. Проекция волновой функции на плоскость XY с интегрированием по оси z приведена на рисунке 5.13 в моменты времени $t = 0$ и $t = 5 \cdot 10^{-17}$ с (зеленые линии уровня). В данном расчете использовались пять волновых пакетов на электрон. Для сравнения приведен расчет динамики волновой функции электрона из идентичного начального состояния с помощью более точного метода численного решения уравнения Шредингера (метода оператора расщепления, split operator Fourier transform, SOFT) [551] и метода вигнеровских траекторий [552]. Расчеты с применением последних двух методов проведены П. Грабовским и А. Маркманом.

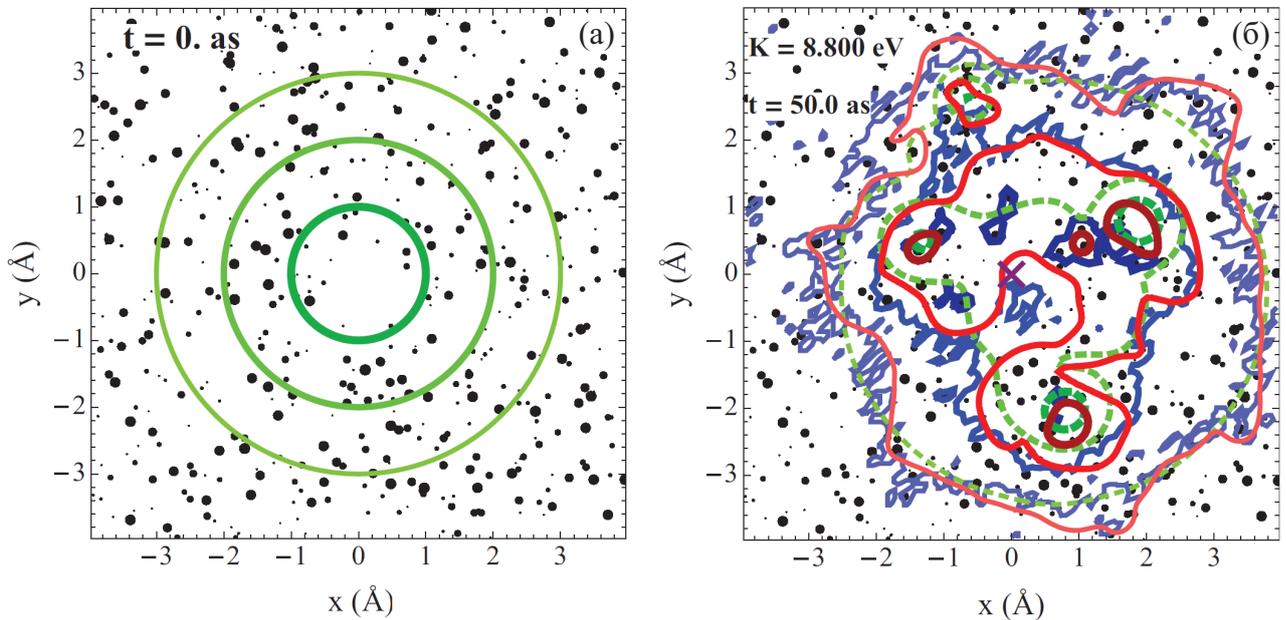


Рис. 5.13. Распределение квадрата модуля волновой функции электрона, движущегося в среде рассеивающих центров (показаны черными точками), в различные моменты времени: (а) $t = 0$, (б) $t = 5 \cdot 10^{-17}$ с. Зеленые линии различной интенсивности соответствуют уровням 60.7 % (внутренняя), 13.5 % (промежуточная) и 1.1 % (внешняя) от максимальной амплитуды для метода МДРВП с $N_{wp} = 5$, красные линии — то же для решения уравнения Шредингера методом оператора расщепления, синие — то же для метода вигнеровских траекторий. Крестиком на рисунке (б) отмечено начальное положение электрона.

Сравнение результатов расчетов показывает, что профили волновой функции для МДРВП и метода оператора расщепления оказываются близки друг к другу, тогда как метод вигнеровских траекторий дает достаточно зашумленный результат. Таким образом, квазиклассический метод МДРВП позволяет с хорошей точностью описывать делокализацию волновой функции и квантовую динамику

электронов. Точность решения на основе волновых пакетов возрастает с числом базисных функций, однако, произвол в выборе начального приближения для базиса и вырождение матрицы нормировки может приводить к некоторым численным трудностям при увеличении размера базиса.

На этапе выполнения данной работы из-за недостатка вычислительных ресурсов не удалось провести полноценное моделирование неидеальной электронной плазмы методом МДРВП, однако впоследствии результаты такого типа были получены в [553] для плазмы водорода при высоких давлениях.

5.3. Расчет обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов

5.3.1. Учет обменных эффектов с использованием метода МДВПА

Описанный ранее способ учета многочастичных квантовых эффектов в МДВП заключается в переходе к приближению Хартри-Фока с антисимметризацией волновой функции электронов, имеющих одинаковую проекцию спина (1.46) (метод МДВПА). Этот метод был предложен в [517] и использован в [522, 523] для моделирования ударно-сжатого водорода. Действительно, с его помощью удалось расширить область применения МДВП на случай неидеальной плазмы с заметной степенью вырождения $\theta < 1$. Для примера на рисунке 5.14 показаны зависимости внутренней энергии $E = E_{\text{tot}}/N$ от концентрации электронов и температуры, полученные различными методами.

В случае МДВП и МДВПА для вывода системы на равновесие использовался алгоритм Монте-Карло, дальнейшая траектория рассчитывалась динамическими вариантами методов. Для сравнения были проведены расчеты методом классической МД с модифицированным псевдопотенциалом Кельбга (1.18). Длина траекторий в этих расчетах составляла от 160 фс до 4 пс в зависимости от рассматриваемой плотности, число частиц в классической МД: $N = N_e + N_i = 8192$, в методах МДВП и МДВПА $N = 512 - 1024$.

На рисунке также представлены результаты для метода силового поля для электронов (СПЭ) [525], полученные в данной работе с помощью пакета МД мо-

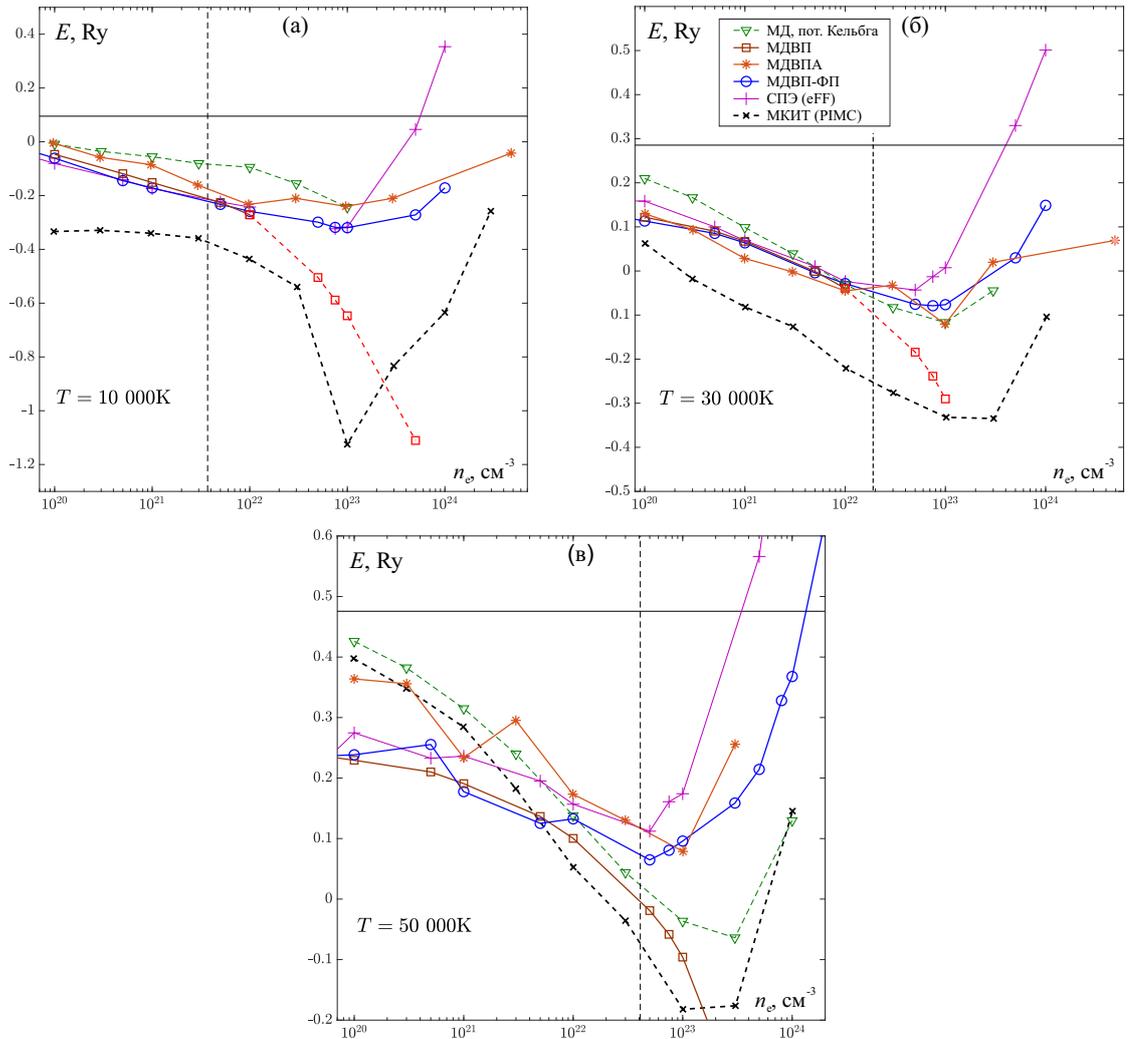


Рис. 5.14. Средняя внутренняя энергия на частицу для водородной плазмы в зависимости от концентрации электронов n_e и температуры: (а) $T = 10^4$ К, (б) $T = 3 \cdot 10^4$ К, (в) $T = 5 \cdot 10^4$ К. Результаты получены различными методами моделирования: треугольники — классическая МД с псевдопотенциалом Кельбга (1.18), квадраты — МДВП, звездочки — МДВПА, кружки — МДВП-ФП, плюсы — СПЭ, крестики — МКИТ [142]. Вертикальная пунктирная линия — граница вырождения $\theta = 1$, горизонтальная сплошная линия — энергия идеального газа $E = \frac{3}{2} k_B T$.

делирования LAMMPS [526, 527]. Этот метод кратко описан в разделе 1.3.6, он позволяет учесть обменно-корреляционные эффекты на основе псевдопотенциального подхода. Результаты, полученные методом МДВП-ФП, обсуждаются далее в разделе 5.3.

Рисунок 5.14 показывает, что общий характер зависимости энергии от концентрации является сходным для разных методов — кривые проходят через минимум вблизи $n_e \sim 10^{23}$ cm^{-3} и асимптотически стремятся к значению для идеального газа при малых плотностях. Исключение составляет лишь метод МДВП, где эти зависимости имеют монотонный характер без роста энергии при боль-

ших плотностях. При этом кривые, полученные методами МДВП и классической МД обрываются при некотором значении концентрации, так как расчеты для более плотных систем приводят к кристаллизации электронов, являющейся вычислительным артефактом. Как видно из рисунка, учет обменного взаимодействия в методе МДВПА позволяет получить корректные результаты во всем рассмотренном диапазоне концентраций и, в частности, воспроизвести рост энергии при $n_e \gtrsim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, связанный с обменным взаимодействием электронов и наблюдавшийся в более точных расчетах методом Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (МКИТ) [142].

Ввиду большей точности расчеты методом МКИТ здесь можно рассматривать как эталонные. Систематическое расхождение между МДВПА 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, как было указано ранее, воспроизводятся методами МДВП и МДВП-ФП, но их энергии не совпадают с точным квантово-механическим результатом при использовании одного волнового пакета на электрон. Более корректный учет связанных состояний может быть проведен при рассмотрении электрона в базисе нескольких волновых пакетов. При высоких температурах различие методов в области малых плотностей уменьшается, так как уменьшается и вклад связанных состояний. Отсутствие точного совпадения между результатами, полученными МД, МДВП и МДВПА при малых плотностях, связано с недостаточной точностью усреднения.

Еще один интересный факт, следующий из рисунка 5.14, заключается в том, что метод классической МД с модифицированным псевдопотенциалом Кельбга показывает неплохие результаты за формальной границей вырождения, причем точность полученных этим методом значений энергии даже выше, чем методом МДВП без антисимметризации. Этот факт уже отмечался в разделе 2.1 при обсуждении статической проводимости (см. рисунок 2.1).

Метод СПЭ является по сути упрощенной версией МДВПА. Он также позволяет, в отличие от МДВП и классической МД, проводить расчеты при высоких плотностях электронов, однако его результаты для энергии оказываются несколько завышенными. Причину этого несложно увидеть на рисунке 5.15, где показан

фактический потенциал взаимодействия двух электронов с различными комбинациями проекций спина. Видно, что в методе СПЭ энергия взаимодействия электронов с одинаковой проекцией спина $S = 1$ существенно превышает таковую для метода МДВПА, то есть имеет место некоторая переоценка обменного взаимодействия. С учетом того, что при $n_e < 10^{23} \text{ см}^{-3}$ неплохие результаты показывает классическая МД, обладающая по сравнению с СПЭ большим быстродействием и лишенная проблем с расплыванием волновых пакетов, целесообразность применения метода СПЭ для моделирования водородной плазмы при этих плотностях вызывает сомнения. Однако, он может быть очень полезен для моделирования плазмы из других химических элементов, что подтверждается практикой его применения, а также для получения оценочных результатов в области $n_e > 10^{23} \text{ см}^{-3}$, где он выигрывает по быстродействию у методов МДВПА, МДВП-ФП и МКИТ.

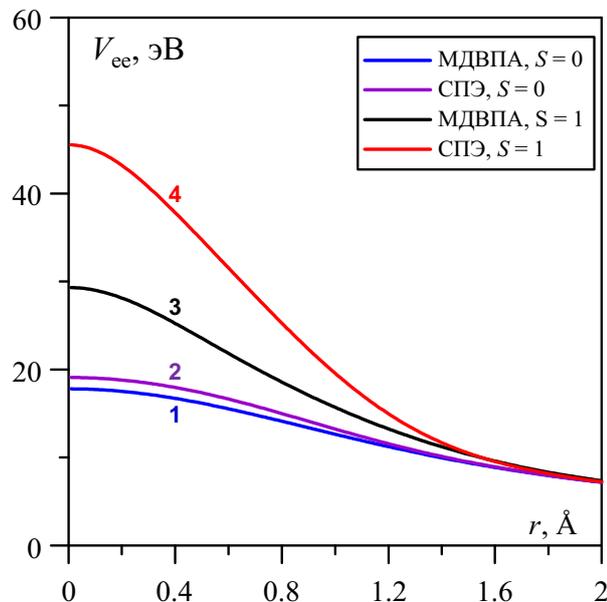


Рис. 5.15. Эффективный потенциал взаимодействия двух электронов в методе МДВПА (кривые 1, 3) и СПЭ (кривые 2, 4). Результаты получены для электронов с противоположной проекцией спина $S = 0$ (кривые 1, 2) и с одинаковой проекцией спина $S = 1$ (кривые 3, 4).

Несмотря на продемонстрированные преимущества, метод МДВПА имеет и ряд недостатков: а) учет только только обменных эффектов взаимодействия электронов, б) высокая вычислительная сложность метода из-за необходимости вычисления и инвертирования достаточно плотно заполненной норм-матрицы при решении уравнения (1.48), а также расчета матричных элементов гамильтониана и их производных.

Для оценки влияния сложности расчетов на быстродействие было проведено исследование, результат которого показан на рисунке 5.16. Здесь следует отметить, что расчет энергии электрон–электронного взаимодействия в методе МДВП, вообще говоря, требует четырехкратного суммирования по матричным элементам v_{klmn}^{ee} (в общем виде сумма задается выражением (5.13), но при использовании одного волнового пакета на электрон не требуется суммирование по индексам $\alpha, \beta, \gamma, \delta$). Таким образом, время выполнения одного шага по времени должно расти с числом частиц как $t_{\text{step}} \sim N_e^4$. Тем не менее, оптимизация численного алгоритма позволила (по крайней мере в исследованном диапазоне параметров) получить асимптотику $t_{\text{step}} \sim N_e^2$, совпадающую с асимптотикой для МДВП, СПЭ и классической МД. В целом рисунок 5.16 показывает, что различие в быстродействии методов МДВП и МДВПА составляет от двух до трех порядков величины, что может быть критичным для ряда задач, требующих большого числа частиц в системе.

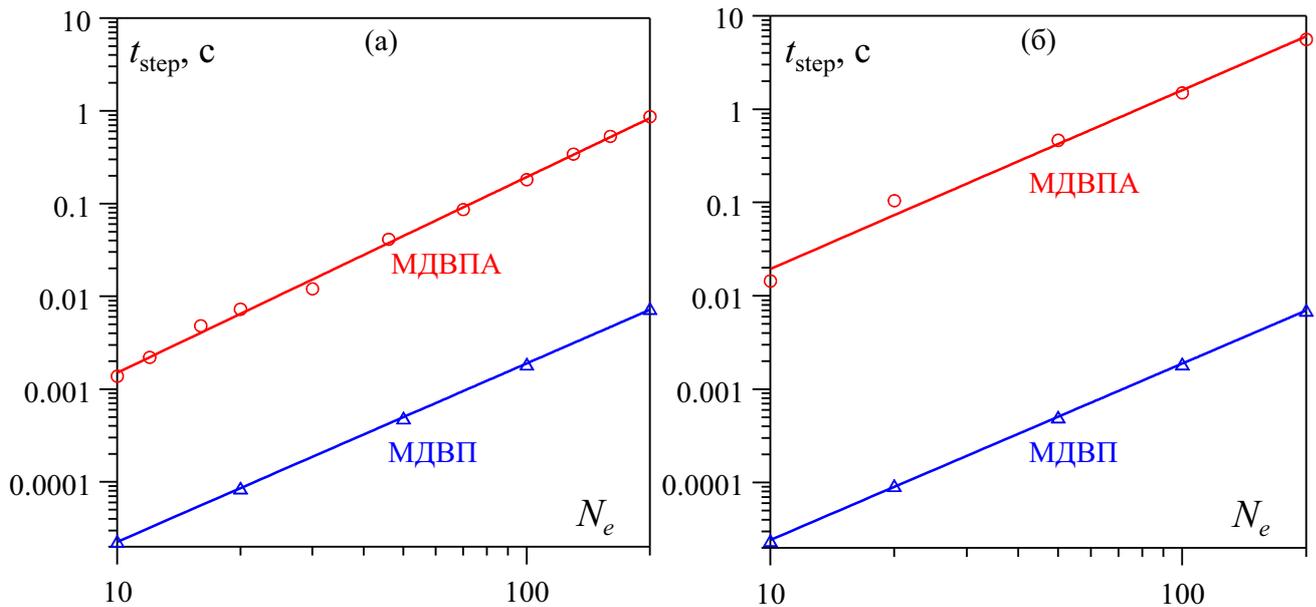


Рис. 5.16. Зависимость времени выполнения одного шага по времени от числа волновых пакетов в системе для методов МДВП (треугольники) и МДВПА (кружки) при моделировании плазмы водорода с параметрами: (а) $T = 3 \cdot 10^4$ К, $n_e = 1.3 \cdot 10^{21}$ см $^{-3}$, $\Gamma = 0.98$, $\theta = 15.8$; (б) $T = 10^4$ К, $n_e = 2 \cdot 10^{23}$ см $^{-3}$, $\Gamma = 5.95$, $\theta = 0.07$.

5.3.2. Учет обменно-корреляционных эффектов с использованием теории функционала плотности

В рамках данной работы совместно с И.А. Валуевым и Я. Лавриненко был предложен еще один метод учета эффектов антисимметризации в методе МДВП, в котором обменно-корреляционные эффекты рассчитываются на основе теории функционала плотности (ТФП) по аналогии с квантовой МД, описанной в разделе 1.3.4. Для сокращения названия метода мы будем пользоваться аббревиатурой МДВП-ФП.

В методе МДВП-ФП, как и в МДВПА/СПЭ, электронам изначально присваиваются значения проекции спина вверх или вниз, причем, как правило, $N_e^\uparrow = N_e^\downarrow = N_e/2$. Далее внутри расчетной ячейки вводится дополнительная трехмерная пространственная сетка, и на каждом шаге по времени рассчитываются сеточные значения суммарной плотности (концентрации) электронов

$$n_\uparrow(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{N_e^\uparrow} \varphi_k(\mathbf{r})\varphi_k^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad n_\downarrow(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{N_e^\downarrow} \varphi_k(\mathbf{r})\varphi_k^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$n(\mathbf{r}) = n_\uparrow(\mathbf{r}) + n_\downarrow(\mathbf{r}). \quad (5.15)$$

Одноэлектронные волновые функции $\varphi_k(\mathbf{r})$ могут быть представлены одним (1.41) или несколькими (5.8) гауссовскими волновыми пакетами. Приведенные в настоящей работе результаты относятся к варианту с одним волновым пакетом на электрон, который обеспечивает наиболее высокую скорость работы программы.

На основе значений электронной плотности вычисляется энергия

$$E_a[n] = E_{XC}[n] + T_s[n] - T_{WP} + E_{self}, \quad (5.16)$$

$$E_{XC}[n_\uparrow, n_\downarrow] = \int \epsilon_{XC}(n_\uparrow, n_\downarrow) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (5.17)$$

$$T_s[n] = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3} \int n(\mathbf{r})^{5/3} d\mathbf{r}, \quad (5.18)$$

где $E_{XC}[n]$ — функционал обменно-корреляционного взаимодействия, $T_s[n]$ — кинетическая энергия электронного газа при нулевой температуре, T_{WP} — полная энергия невзаимодействующих волновых пакетов в ограничивающем потенциале в

приближении Хартри, E_{self} — дополнительный член для компенсации коррекции на самодействие в функционале $E_{\text{XC}}[n]$. Для функционала $E_{\text{XC}}[n]$ используется приближение локальной плотности с учетом спина (LSDA) [460]. В качестве граничных условий для устранения расплывания волновых пакетов применяются отражающие стенки.

Энергия E_a является добавкой к полной энергии системы (5.2), а ее производные используются для расчета сил, действующих на частицы в (1.44). Таким образом, нам удалось учесть обменно-корреляционное взаимодействие, сохранив достаточно простые уравнения движения для электронов, как и в методе СПЭ, но при этом точность учета многочастичных квантовых эффектов, как будет показано ниже, оказалась выше. Ценой этого улучшения стала необходимость расчета сеточных значений электронной плотности (5.15) и функционала (5.17). Однако, эта часть алгоритма хорошо распараллеливается и может быть эффективно реализована на современных графических ускорителях, которые дают ускорение на 1-2 порядка величины. Полное описание алгоритма и тесты производительности приведены в [538]. С учетом этого полученный метод показывает более быстрое действие, чем МДВПА, хотя и меньшее, чем в исходный метод МДВП или СПЭ.

В качестве простейшего результата учета обменно-корреляционного взаимодействия в МДВП-ФП можно привести уточненное значение энергии диссоциации молекулы водорода. Тогда как метод МДВП с одним волновым пакетом на электрон дает значение 2.91 эВ, что на 36% отличается от экспериментального значения 4.52 эВ, в методе МДВП-ФП эта энергия составляет 4.23 эВ, что лишь на 5% отличается от эксперимента.

Результаты моделирования неидеальной плазмы водорода, дейтерия и гелия методом МДВП-ФП приведены на рисунках 5.17 — 5.19. Во всех случаях использовались ОГУ, описанные в разделе 5.1.3. Для вывода системы на равновесие применялся метод Монте-Карло, а последующая траектория рассчитывалась динамическим вариантом метода. Методика расчета термодинамических параметров плазмы, изоэнтропы и ударной адиабаты изложена в [538].

Рисунок 5.17 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 concentra-

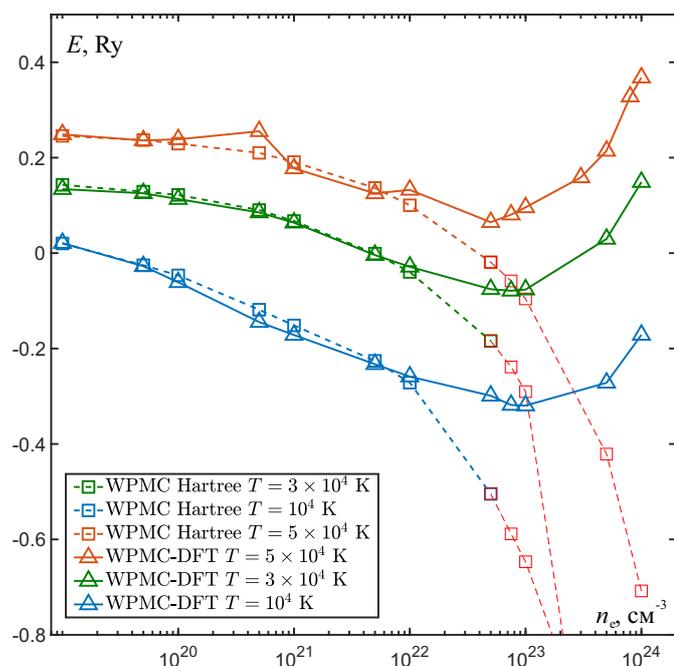


Рис. 5.17. Средняя внутренняя энергия на частицу для плазмы водорода в зависимости от концентрации электронов n_e и температуры T (значения указаны на графике): квадраты — расчеты методом МДВП, треугольники — МДВП-ФП.

ции, результаты для МДВП-ФП демонстрируют рост энергии при больших плотностях, что полностью согласуется с расчетами методами МКИТ и МДВПА. Данные результаты показаны также на рисунке 5.14 в сравнении с другими методами моделирования. Видно, что точность МДВП-ФП оказывается не хуже более сложного с вычислительной точки зрения метода МДВПА. За счет высокого быстродействия в МДВП-ФП использовался больший объем статистического усреднения, что позволило получить более гладкие зависимости.

Экспериментальные данные по ударной адиабате дейтерия, показанные на рисунке 5.18, подробно обсуждались в разделе 1.1.6. Результаты экспериментов [125, 126] не приведены на графиках, так как достоверность их была подвергнута сомнению во многих последующих работах. На рисунке также представлены результаты расчетов в рамках химической модели плазмы (см. раздел 1.2.3) и компьютерного моделирования различными вариантами квантового метода МК (см. раздел 1.3.5), СПЭ, МДВПА и МДВП-ФП.

Рисунок показывает, что результаты, полученные методом МДВПА в работе [523], очень далеко отстоят от массива экспериментальных данных и других теоретических методов. Причина этого расхождения до конца не понятна, так как

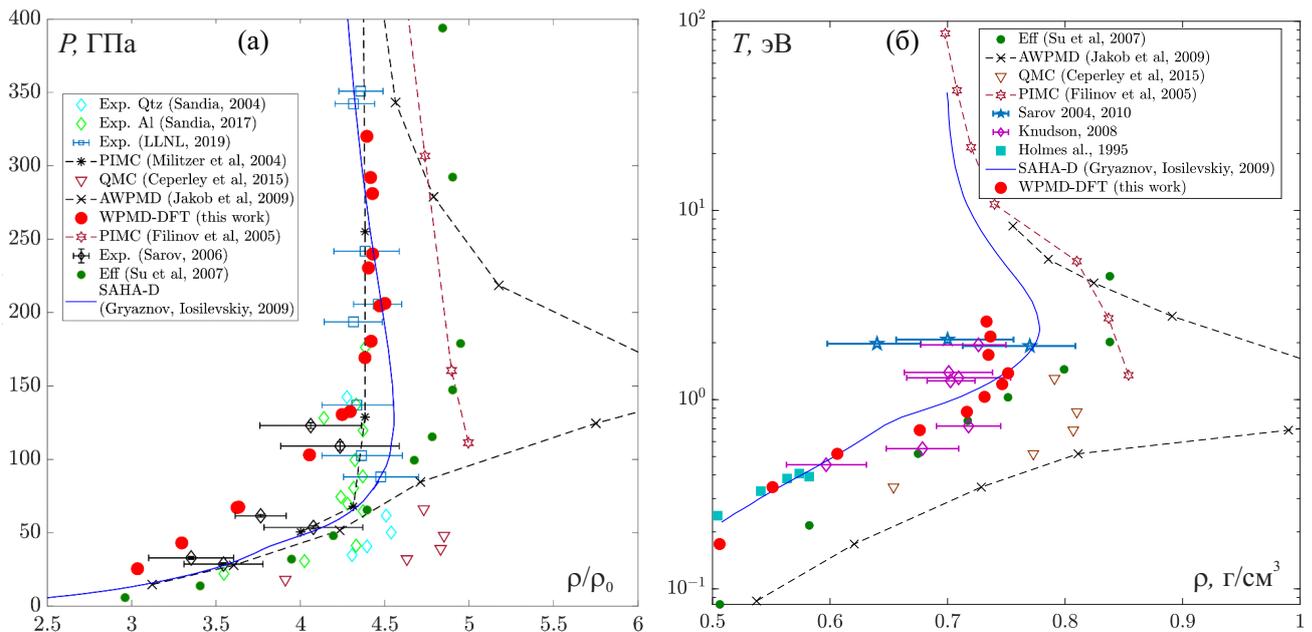


Рис. 5.18. Ударная адиабата дейтерия: (а) зависимость давления от степени сжатия ρ/ρ_0 , $\rho_0 = 0.167 \text{ г}/\text{см}^3$; (б) зависимость температуры от плотности. Экспериментальные данные на рисунке (а): черные ромбы — [135], зеленые ромбы — [130], голубые ромбы — [136], квадраты — [137]; на рисунке (б): квадраты — [149], синие звезды — [554], фиолетовые ромбы — [555]; теория и моделирование на рисунках (а) и (б): синяя линия — химическая модель SAHA-D [326], черные звездочки и пунктир — МКИТ [474], красные звезды и пунктир — МКИТ [503], треугольники — квантовый метод МК [556], черные крестики и пунктир — МДВПА [523], зеленые кружки — метод СПЭ (данная работа, расчет по методу [525]), красные кружки — МДВП-ФП (данная работа).

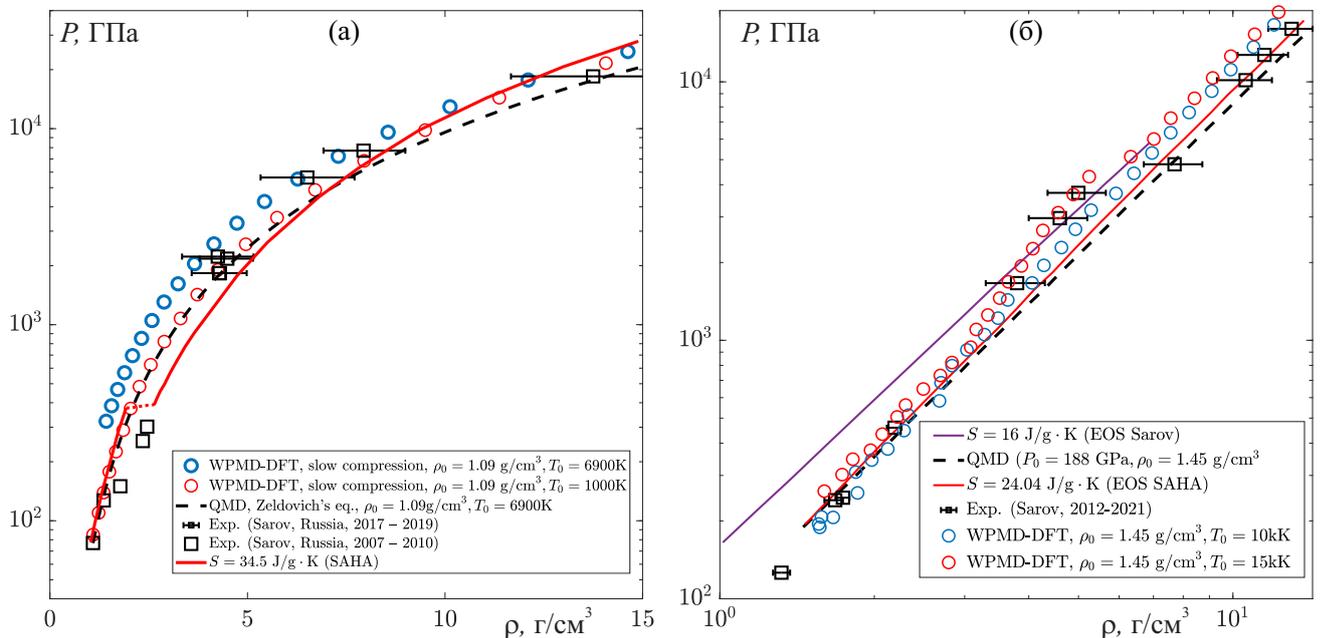


Рис. 5.19. Зависимость давления от плотности при изэнтропическом сжатии (а) дейтерия, (б) гелия: ромбы — эксперимент [152], квадраты — эксперименты [162, 167–171], сплошные линии — расчеты по уравнению состояния и модели SAHA-D [170, 171], пунктир — моделирование методом КМД [171], кружки — моделирование методом МДВП-ФП (данная работа) из различных начальных условий (показаны на графике).

расчеты, проведенные методом МДВПА в настоящей работе, в целом неплохо согласуются, например, с результатами моделирования методом МКИТ (рисунок 5.14). Возможной причиной систематической ошибки в [523] являлось использование ограничения ширины волновых пакетов по методу [516] с неверно подобранным значением параметра s_0 . Напомним, что наши расчеты показали существенное влияние этого параметра на описание столкновительных процессов в плазме (см. рисунок 5.3).

Также на рисунке 1.1.6 видно, что метод СПЭ показывает несколько завышенные значения сжимаемости дейтерия. Как уже обсуждалось, этот метод имеет меньшую точность для описания водорода и дейтерия чем МДВПА и МДВП-ФП, поэтому его целесообразно применять для более тяжелых атомов. Однако, ввиду его высокого быстродействия, он может быть полезен и для описания, например, фазовых переходов [528] где количество частиц в системе может играть важное значение. В этом случае приведенные данные позволяют оценить ошибку, вносимую этим методом в расчет давления и энергии. Результаты, полученные методом квантового Монте-Карло, в целом неплохо согласуются с экспериментальными данными, при этом метод [556] лучше описывает результаты для давления, а метод МКИТ [503] — данные по температуре.

Показанные на рисунке результаты для 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 имеет гораздо большее быстродействие, 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.

На рисунке 5.19 показано сравнение расчетных и экспериментальных данных для изоэнтропии дейтерия и гелия. Результаты МДВП-ФП в целом хорошо

согласуются с экспериментальными точками [162, 167–171], хотя и не описывают скачок плотности, полученный в [152] и повторно исследованный в [170, 171], который связывается с плазменным фазовым переходом (см. раздел 1.1.6). Следует отметить, что указанный скачок плотности не наблюдается и в результатах моделирования методом КМД, хотя может быть описан моделью SAHA-D, методом МКИТ и некоторыми другими расчетными методиками.

Преимущество МДВП-ФП в данном случае заключается в существенно более быстром методе расчета по сравнению с КДМ. Поскольку с помощью КДМ достаточно сложно провести моделирование непосредственно процесса изоэнтропического сжатия, по сложившейся практике сначала рассчитывается набор сеточных значений внутренней энергии и давления во всей исследуемой области в зависимости от переменных ρ и T , а изоэнтропа определяется путем численного интегрирования уравнения Ферми-Зельдовича [557]. С учетом возможности совместного моделирования динамики электронов и ионов в методе МДВП-ФП доступно прямое моделирование процесса сжатия. Если выбранная скорость сжатия достаточно мала и не приводит к дополнительному нагреву плазмы в результате неравновесных процессов (этот фактор можно контролировать в моделировании), то процесс следует считать изоэнтропическим. Данная методика существенно ускоряет расчеты, при том что точность полученных результатов, как видно из рисунка 5.19, не ухудшается.

5.4. Выводы к пятой главе

Результаты, описанные в данной главе, показывают возможность создания метода атомистического моделирования, пригодного для рассмотрения как равновесных, так и неравновесных систем, имеющего при этом более точную, чем в классической МД модель взаимодействия частиц. В качестве основы был выбран метод молекулярной динамики с волновыми пакетами, для применения которого к задачам моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы необходимо было решить ряд проблем.

В результате проведенных исследований было предложено два варианта решения проблемы неограниченного расширения волновых пакетов со временем

для электронов вне области сильного взаимодействия. Первый из этих методов основан на ограничении ширины волновых пакетов при выходе электрона из области сильного взаимодействия с ближайшим ионом. Этот метод не искажает динамику частиц при близких столкновениях частиц и обеспечивает приемлемый результат расчета эффективной частоты столкновений со слабой зависимостью от параметра модели. Вторым вариантом решения является использование отражающих граничных условий. Этот метод не имеет дополнительных параметров, однако в нем необходим учет приграничного слоя, исследование которого было предварительно проведено в главе 2 на основе классической МД.

Вторым результатом является создание модификации метода МДВП с несколькими волновыми пакетами на электрон, 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 рассмотрена туннельная ионизация атома водорода под действием короткого лазерного импульса. Ограничения применимости здесь связаны в основном с вычислительной сложностью.

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. Распределение электронной плотности определяется на основе параметров волновых пакетов с учетом их спина. Проведено сопоставление результатов, полученных методами МПВП, МДВПА, МДВП-ФП и СПЭ. На примере расчета уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия показано, что метод МДВП-ФП обеспечивает точность расчета термодинамических свойств, сравнимую с методами квантового Монте-Карло и квантовой МД, сохраняя при этом способность описывать неравновесную динамику электронов.

Результаты данной главы опубликованы в [9, 16, 18, 20, 24–27].

Заключение

Ввиду того, что эксперименты, позволяющие исследовать столкновительные и релаксационные свойства неидеальной электрон–ионной плазмы, достаточно сложны, а наблюдаемые в них величины не всегда могут быть напрямую сопоставлены с теорией, важную роль в развитии и верификации имеющихся теоретических моделей неидеальной плазмы играет компьютерное моделирование. В частности, методы атомистического моделирования предоставляет исчерпывающую информацию о статических и динамических параметрах исследуемой системы.

Как показало проведенное исследование, метод классической МД и созданный на его основе метод МДВП, несмотря на простоту формулировки, являются мощными инструментами для изучения неидеальной плазмы, особенно в области исследования динамических свойств и релаксационных процессов, поэтому часть представленной работы была посвящена развитию этих методов. В частности, были решены следующие задачи:

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. Показано, что эти результаты могут использоваться для расчета продольной проводимости при использовании внутренней области расчетной ячейки. Исследовано влияние приграничного слоя плазмы на результаты моделирования в зависимости от размера системы.
3. Разработан метод исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме в рамках классической МД, использующий анализ пространственно–разрешенной автокорреляционной функции тока.
4. Предложен способ ограничения ширины волновых пакетов в методе МДВП, основанный на вычислении энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом.
5. Рассмотрена модификация метода МДВП с использованием нескольких волновых пакетов на электрон для повышения точности описания связанных

состояний электронов и ионов (МДРВП).

6. 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.

На основе указанных методов и последующего теоретического анализа были получены следующие результаты:

1. Рассчитана статическая и динамическая проводимость неидеальной плазмы со значением параметра неидеальности $0.1 - 5$. Эти данные дополняют и уточняют предыдущие результаты автора диссертации и других авторов.
2. Определена высокочастотная асимптотика эффективной частоты столкновений для модельного псевдопотенциала Кельбга, а также зависимость результатов от температуры, являющейся параметром данного потенциала.
3. Получены новые данные о статической проводимости, а также эффективной частоте столкновений неидеальной электрон-ионной плазмы в зависимости от частоты возмущающего поля и параметров плазмы, дополняющие и уточняющие предыдущие результаты автора диссертации и других авторов.
4. Проведено моделирование установления двойного электрического 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.
5. 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.

6. Проведено моделирование неидеальной плазмы, образованной воздействием фемтосекундного лазерного импульса на наноразмерные металлические кластеры, состоящие из $55 - 10^5$ атомов. Получены данные о величине 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 $0.55 \pm 0.06 (a_B \text{ эВ})^{-1}$.
7. Исследованы колебания электронов в равновесной кластерной наноплазме. Разработана теоретическая модель коллективных колебаний электронов (поверхностных плазмонов), хорошо описывающая полученную в МД моделировании зависимость частоты этих колебаний от размера кластера. Определены декременты затухания для колебаний Ми и ленгмюровских плазменных колебаний в зависимости от параметра неидеальности.
8. 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 энтропии 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 .

Достоверность полученных в работе результатов подтверждается согласием с имеющимися экспериментальными данными, существующими теоретическими

моделями и результатами компьютерного моделирования, проведенного с использованием других методов.

Применение этих результатов лежит в области разработки источников рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов на основе лазерной и кластерной плазмы, в том числе для создания новых методов рентгеновской диагностики вещества с субпикосекундным временным разрешением, инициирования ядерных реакций, развития ядерной фотоники и методов медицинского исследования; оптимизации методов модификации поверхности фемтосекундными лазерными импульсами для создания нанообъектов и поверхностных наноструктур; предсказания процессов формирования униполярных вакуумных дуг и защиты микроволновых устройств ввода энергии в ускорительной технике. Представленные результаты могут быть использованы для дальнейшего совершенствования теоретических моделей, а также в качестве входных параметров для моделирования свойств вещества на больших масштабах методами вычислительной гидродинамики, частиц в ячейке (Particle-in-cell) и др.

Несмотря на большой объем проведенных исследований, не все задачи физики неидеальной электрон-ионной плазмы удастся решить в рамках существующих подходов. Так, например, пока не существует теоретических моделей, полностью согласующейся с данными компьютерного моделирования, для описания: динамической проводимости и эффективной частоты столкновений в широком диапазоне частот возмущающего поля, параметров неидеальности и вырождения; профиля электронного плотности на границе неидеальной плазмы с различной геометрией; зависимости частот и декрементов затухания поверхностных и объемных плазмонов для произвольных параметров кластерной наноплазмы. С методической точки зрения пока не решен вопрос о способе расчета проводимости плазмы в методах молекулярной динамики с волновыми пакетами, а полученные с помощью МДВП-ФП термодинамические данные говорят о необходимости использования более точных функционалов обменно-корреляционного взаимодействия. Эти задачи могут и должны стать предметом дальнейших исследований.

Благодарности

Автор выражает благодарность соавторам публикаций и коллегам Быстро-му Р.Г., Валуеву А.А., Валуеву И.А., Зеленеру Б.В., Иосилевскому И.Л., Казее-ву Н.А., Казеннову А.М., Кобзеву Г.А., Лавриненко Я., Ланкину А.В., Левашо-ву П.Р., Пикузу С.А., Скобелеву И.Ю., Стегайлову В.В., Фаенову А.Я., Филино-ву В.С., Хомкину А.Л., Grabowski P., Insepov Z., Norem J., Raitza T., Reinholz H., Rörke G. и Zwicknagel G., плодотворные дискуссии с которыми, ценные советы и внимание помогли в работе над диссертацией.

Отдельную благодарность хотелось бы выразить Норману Г.Э., идеи которого легли в основу постановки ряда численных экспериментов.

Список сокращений и условных обозначений

АФТ	— автокорреляционная функция тока
ГЦК	— гранецентрированная кристаллическая решетка
КМД	— квантовая молекулярная динамика (QMD)
КМД-ЗВ	— квантовая молекулярная динамика с зависимостью состояний электронов от времени (TD-DFT)
КМД-КТ	— квантовая молекулярная динамика для конечной температуры электронов (FT-DFT)
МД	— молекулярная динамика
МДВП	— молекулярная динамика с волновыми пакетами (молекулярная динамика волновых пакетов)
МДВП-ФП	— молекулярная динамика волновых пакетов с использованием теории функционала плотности
МДВПА	— молекулярная динамика с антисимметризованными волновыми пакетами
МДРВП	— молекулярная динамика с расщепленным волновыми пакетами
МК	— Монте-Карло (метод)
МКВП	— Монте-Карло для волновых пакетов (метод)
МКИТ	— Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям (метод)
МККТ	— Монте-Карло для классических траекторий (метод)
ОГУ	— отражающие граничные условия
ОЦК	— объемноцентрированная кристаллическая решетка
ПГУ	— периодические граничные условия
СПЭ	— метод силового поля для электронов (eFF)
ТФП	— теория функционала плотности (DFT)
LDA	— приближение локальной плотности
LSDA	— приближение локальной плотности с учетом спина
PIC	— метод частиц в ячейке (метод крупных частиц)
TreeMD	— метод молекулярной динамики с древовидной структурой хранения данных

Список литературы

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.
 28. Квантовая статистика систем заряженных частиц / Крефт В.-Д., Кремп Д., Эбелинг В. и Репке Г. — М. : Мир, 1988. — 408 с.
 29. Статистическая физика плотных газов и неидеальной плазмы / Фортов В. Е., Филинов В. С., Ларкин А. С. и Эбелинг В. — М. : Физматлит, 2020. — 672 с.
 30. Фортов В. Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. — 2009. — Т. 179, № 6. — С. 653–687.
 31. Dornheim T., Groth S., Bonitz M. The uniform electron gas at warm dense matter conditions // Phys. Rep. — 2018. — Vol. 744. — P. 1–86.
 32. Saumon D., Chabrier G. Fluid hydrogen at high density: Pressure dissociation // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 44, no. 8. — P. 5122.

33. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле / Эбелинг В., Крефт В.-Д., Кремп Д. и Каклюгин А. С. — М. : Мир, 1979. — 263 с.
34. Ultracold neutral plasmas / Killian T. C., Pattard T., Pohl T., and Rost J. M. // *Phys. Rep.* — 2007. — Vol. 449, no. 4-5. — P. 77–130.
35. Фортов В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т. Физика неидеальной плазмы. — М. : Физматлит, 2010. — 528 с.
36. The role of the molecular-metallic transition of hydrogen in the evolution of Jupiter, Saturn, and brown dwarfs / Saumon D., Hubbard W. B., Chabrier G., and Van Horn H. M. // *Astrophysical J.* — 1992. — Vol. 391. — P. 827–831.
37. Liquid metallic hydrogen and the structure of brown dwarfs and giant planets / Hubbard W. B., Guillot T., Lunine J. I., Burrows A., Saumon D., Marley M. S., and Freedman R. S. // *Phys. Plasmas.* — 1997. — Vol. 4, no. 5. — P. 2011–2015.
38. Guillot T. Interiors of giant planets inside and outside the solar system // *Science.* — 1999. — Vol. 286, no. 5437. — P. 72–77.
39. Remington B. A. High energy density laboratory astrophysics // *Plasma Phys. Controlled Fusion.* — 2005. — Vol. 47, no. 5A. — P. A191.
40. Properties of dense fluid hydrogen and helium in giant gas planets / Vorberger J., Tamblyn I., Bonev S. A., and Militzer B. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2007. — Vol. 47, no. 4-5. — P. 375–380.
41. A massive core in Jupiter predicted from first-principles simulations / Militzer B., Hubbard W. B., Vorberger J., Tamblyn I., and Bonev S. A. // *Astrophysical J.* — 2008. — Vol. 688, no. 1. — P. L45.
42. Ab initio equation of state data for hydrogen, helium, and water and the internal structure of Jupiter / Nettelmann N., Holst B., Kietzmann A., French M., Redmer R., and Blaschke D. // *Astrophysical J.* — 2008. — Vol. 683, no. 2. — P. 1217.
43. Nettelmann N., Püstow R., Redmer R. Saturn layered structure and homogeneous evolution models with different EOSs // *Icarus.* — 2013. — Vol. 225, no. 1. — P. 548–557.
44. H/He demixing and the cooling behavior of Saturn / Püstow R., Nettelmann N., Lorenzen W., and Redmer R. // *Icarus.* — 2016. — Vol. 267. — P. 323–333.
45. Shukla P. K., Eliasson B. Colloquium: Nonlinear collective interactions in quan-

- tum plasmas with degenerate electron fluids // *Rev. Mod. Phys.* — 2011. — Vol. 83, no. 3. — P. 885.
46. Daligault J., Gupta S. Electron–ion scattering in dense multi-component plasmas: Application to the outer crust of an accreting neutron star // *Astrophysical J.* — 2009. — Vol. 703, no. 1. — P. 994.
 47. Christensen-Dalsgaard J. Helioseismology // *Rev. Mod. Phys.* — 2002. — Vol. 74, no. 4. — P. 1073.
 48. SAHA-S Thermodynamic Model of Solar Plasma / Gryaznov V. K., Iosilevskiy I. L., Fortov V. E., Starostin A. N., Roerich V. K., et al. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2013. — Vol. 53, no. 4-5. — P. 392–396.
 49. Gryaznov V. K., Iosilevskiy I. L. Thermodynamic Properties of Hydrogen Plasma to Megabars // *Contrib. Plasma Phys.* — 2016. — Vol. 56, no. 3-4. — P. 352–360.
 50. Fletcher A., Close S., Mathias D. Simulating plasma production from hypervelocity impacts // *Phys. Plasmas.* — 2015. — Vol. 22, no. 9. — P. 093504.
 51. Falk K. Experimental methods for warm dense matter research // *High Power Laser Science and Engineering.* — 2018. — Vol. 6.
 52. Alekseev V. A., Iakubov I. T. Non-ideal plasmas of metal vapours // *Phys. Rep.* — 1983. — Vol. 96, no. 1. — P. 1–69.
 53. Boehler R. Diamond cells and new materials // *Materials Today.* — 2005. — Vol. 8, no. 11. — P. 34–42.
 54. Bassett W. A. Diamond anvil cell, 50th birthday // *High Pressure Res.* — 2009. — Vol. 29, no. 2. — P. 163–186.
 55. Terapascal static pressure generation with ultrahigh yield strength nanodiamond / Dubrovinskaia N., Dubrovinsky L., Solopova N. A., et al. // *Sci. Adv.* — 2016. — Vol. 2, no. 7. — P. e1600341.
 56. Dias R. P., Silvera I. F. Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen // *Science.* — 2017. — Vol. 355, no. 6326. — P. 715–718.
 57. The structure of iron in Earth’s inner core / Tateno S., Hirose K., Ohishi Y., and Tatsumi Y. // *Science.* — 2010. — Vol. 330, no. 6002. — P. 359–361.
 58. Coupling static and dynamic compressions: first measurements in dense hydrogen / Loubeyre P., Celliers P. M., Hicks D. G., Henry E., Dewaele A., et al. // *High Pressure Res.* — 2004. — Vol. 24, no. 1. — P. 25–31.

59. Hugoniot data for helium in the ionization regime / Eggert J., Brygoo S., Loubeyre P., McWilliams R. S., Celliers P. M., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100, no. 12. — P. 124503.
60. Insulator-to-conducting transition in dense fluid helium / Celliers P. M., Loubeyre P., Eggert J. H., Brygoo S., McWilliams R. S., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 104, no. 18. — P. 184503.
61. Extended data set for the equation of state of warm dense hydrogen isotopes / Loubeyre P., Brygoo S., Eggert J., Celliers P. M., Spaulding D. K., et al. // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 86, no. 14. — P. 144115.
62. Analysis of laser shock experiments on precompressed samples using a quartz reference and application to warm dense hydrogen and helium / Brygoo S., Millot M., Loubeyre P., Lazicki A. E., Hamel S., et al. // *J. Appl. Phys.* — 2015. — Vol. 118, no. 19. — P. 195901.
63. Zaghoo M., Salamat A., Silvera I. F. Evidence of a first-order phase transition to metallic hydrogen // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93, no. 15. — P. 155128.
64. Evidence of hydrogen-helium immiscibility at Jupiter-interior conditions / Brygoo S., Loubeyre P., Millot M., Rygg J. R., Celliers P. M., Eggert J. H., Jeanloz R., and Collins G. W. // *Nature.* — 2021. — Vol. 593, no. 7860. — P. 517–521.
65. Температурная зависимость электропроводности плотной цезиевой плазмы, полученной импульсным изобарным омическим нагревом / Ермохин Н. В., Ковалев Б. М., Кулик П. П. и Рябый В. А. // *ТВТ.* — 1977. — Т. 15, № 4. — С. 695–702.
66. Дихтер И. Я., Зейгарник В. А. Уравнение состояния и электропроводность плотной сильноионизированной плазмы щелочных металлов // В сб.: *Обзоры по теплофизическим свойствам веществ.* — М. : ИВТАН, 1981. — 4. — С. 59–101.
67. DeSilva A. W., Katsouros J. D. Electrical conductivity of dense copper and aluminum plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 57, no. 5. — P. 5945.
68. Korobenko V. N., Rakhel A. D. Electrical resistivity and equation of state measurements on hot expanded aluminum in the metal-nonmetal transition range // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75, no. 6. — P. 064208.
69. Коробенко В. Н., Рахель А. Д. Переход расширенного жидкого железа в

- неметаллическое состояние при сверхкритическом давлении // ЖЭТФ. — 2011. — Т. 139, № 4. — С. 746–754.
70. Korobenko V. N., Rakhel A. D. On the electronic specific heat of liquid tungsten // J. Phys.: Condens. Matter. — 2014. — Vol. 26, no. 4. — P. 045701.
71. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., Rakhel A. D. Experimental study of liquid carbon // J. Phys.: Condens. Matter. — 2016. — Vol. 28, no. 26. — P. 265501.
72. Асиновский Э. И., Зейгарник В. А. Разряды высокого давления // ТВТ. — 1974. — Т. 12, № 6. — С. 1278–1291.
73. Федорович О. А. О влиянии плазменной частоты на сплошной спектр излучения неидеальной плазмы импульсного разряда в воде в видимом диапазоне // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Плазменная электроника и новые методы ускорения. — 2008. — № 4. — С. 283–287.
74. Федорович О. А., Войтенко Л. М. О коэффициентах распада неидеальной плазмы импульсных разрядов в воде при концентрациях электронов $2 \cdot 10^{20} \geq N_e \geq 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Плазменная электроника и новые методы ускорения. — 2008. — № 4. — С. 288–293.
75. Anders S., Anders A. Effects of Non-Ideality and Non-Equilibrium in the Cathode Spot Plasma of Vacuum Arcs // Contrib. Plasma Phys. — 1989. — Vol. 29, no. 4-5. — P. 537–543.
76. Jüttner B. Cathode spots of electric arcs // J. Phys. D. — 2001. — Vol. 34, no. 17. — P. R103.
77. Mesyats G. A. Ecton mechanism of the vacuum arc cathode spot // IEEE Trans. Plasma Sci. — 1995. — Vol. 23, no. 6. — P. 879–883.
78. Schwirzke F. R. Vacuum breakdown on metal surfaces // IEEE Trans. Plasma Sci. — 1991. — Vol. 19, no. 5. — P. 690–696.
79. Visual and electrical evidence supporting a two-plasma mechanism of vacuum breakdown initiation / Castano C. H., Aghazarian M., Caughman J. B. O., and Ruzic D. N. // IEEE Trans. Plasma Sci. — 2012. — Vol. 40, no. 4. — P. 1217–1222.
80. Norem J., Insepov Z., Hassanein A. An integrated approach to understanding RF vacuum arcs // Sci. Rep. — 2021. — Vol. 11, no. 1. — P. 1–10.
81. Investigation of a Near-Electrode Plasma Formed in the Atmospheric Dis-

- charge with Employment of Picosecond Laser Probing / Parkevich E. V., Medvedev M. A., Khirianova A. I., Ivanenkov G. V., Agafonov A. V., et al. // *Journal of Russian Laser Research*. — 2019. — Vol. 40, no. 1. — P. 56–63.
82. Spatial evolution of the plasma kernel produced by nanosecond discharges in air / Stepanyan S., Minesi N., Tibère-Inglesse A., Salmon A., Stancu G. D., and Laux C. O. // *J. Phys. D*. — 2019. — Vol. 52, no. 29. — P. 295203.
83. Фортов В. Е. Мощные ударные волны на Земле и в космосе. — М. : Физматлит, 2018. — 416 с.
84. Techniques for studying materials under extreme states of high energy density compression / Park H.-S., Ali S. J. M., Celliers P. M., Coppari F., Eggert J., et al. // *Phys. Plasmas*. — 2021. — Vol. 28, no. 6. — P. 060901.
85. Электропроводность неидеальной плазмы / Иванов Ю. В., Минцев В. Б., Фортов В. Е. и Дремин А. Н. // *ЖЭТФ*. — 1976. — Т. 71, № 1. — С. 216–224.
86. Минцев В. Б., Фортов В. Е., Грязнов В. К. Электропроводность высокотемпературной неидеальной плазмы // *ЖЭТФ*. — 1980. — Т. 79.
87. Mintsev V. B., Zaporozhets Y. B. Reflectivity of dense plasma // *Contrib. Plasma Phys.* — 1989. — Vol. 29, no. 4-5. — P. 493–501.
88. Коэффициент отражения плотной плазмы ксенона в красной области спектра (694 нм) / Запорожец Ю. Б., Минцев В. Б., Грязнов В. К. и Фортов В. Е. // В сб. “Физика экстремальных состояний-2002” под ред. Фортова ВЕ—Черноголовка: Изд. ИПХФ РАН. — 2002. — С. 188–189.
89. Питаевский Л. П., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 т. — 2-е, испр. изд. — М. : Физматлит, 2007. — Т. X. Физическая кинетика. — 536 с.
90. Berkovsky M. A., Kurilenkov Y. K., Milchberg H. M. Skin effect and reflectivity in strongly coupled plasmas // *Phys. Fluids B*. — 1992. — Vol. 4, no. 8. — P. 2423–2428.
91. On the dense plasma reflectivity and skin depth at strong coupling / Kurilenkov Y. K., Berkovsky M. A., Hocini S., and Skowronek M. A. // *J. Phys. B*. — 1995. — Vol. 28, no. 10. — P. 2021.
92. Anomalous reflectivity from nonideal plasma / Magnitskiy S. A., Morozov I. V., Norman G. E., and Valuev A. A. // *J. Phys. A*. — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 5999.

93. Density profile in shock wave fronts of partially ionized xenon plasmas / Reinholz H., Röpke G., Morozov I., Mintsev V., Zaporozhets Y., Fortov V., and Wierling A. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 5991.
94. Reflectivity of shock compressed xenon plasma / Reinholz H., Röpke G., Wierling A., Mintsev V., and Gryaznov V. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2003. — Vol. 43, no. 1. — P. 3–10.
95. Морозов И. В. Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме : Дисс. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.08 : защищена 25.03.04 ; ОИВТ РАН. — М., 2004. — 112 с.
96. Reflectivity of nonideal plasmas / Zaporozhets Y., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V., Reinholz H., Raitza T., and Röpke G. // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4329.
97. Interaction of explosively driven dense plasmas with a low-intensity laser radiation / Zaporozhets Y., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V., Reinholz H., and Röpke G. // *J. Phys. A.* — 2009. — Vol. 42, no. 21. — P. 214063.
98. The Investigation of s-and p-Polarized Reflectivities of Nonideal Plasma / Zaporozhets Y. B., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V. E., Reinholz H., and Röpke G. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2010. — Vol. 50, no. 1. — P. 60–63.
99. Optical reflectivity of xenon plasma revisited / Zaporozhets Y. B., Omarbakiyeva Y. A., Reinholz H., Röpke G., Mintsev V. B., and Gryaznov V. K. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2016. — Vol. 56, no. 5. — P. 467–474.
100. Polarized angular-dependent reflectivity and density-dependent profiles of shock-compressed xenon plasmas / Zaporozhets Y., Mintsev V., Fortov V., Reinholz H., Röpke G., Rosmej S., and Omarbakiyeva Y. A. // *Phys. Rev. E.* — 2019. — Vol. 99. — P. 043202.
101. The investigation of the optics of shock-compressed strongly correlated plasma / Zaporozhets Y. B., Mintsev V. B., Gryaznov V. K., Rosmej S., Reinholz H., and Röpke G. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2021. — Vol. 61, no. 10. — P. e202100110.
102. Desjarlais M. P. Density functional calculations of the reflectivity of shocked xenon with ionization based gap corrections // *Contrib. Plasma Phys.* — 2005. — Vol. 45, no. 3-4. — P. 300–304.
103. Ab initio calculation of shocked xenon reflectivity / Norman G., Saitov I., Ste-

- gailov V., and Zhilyaev P. // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Vol. 91, no. 2. — P. 023105.
104. Norman G., Saitov I. Brewster angle and reflectivity of optically nonuniform dense plasmas // *Phys. Rev. E.* — 2016. — Vol. 94, no. 4. — P. 043202.
105. Electrical conductivity of a dense plasma / Ng A., Parfeniuk D., Celliers P., DaSilva L., More R. M., and Lee Y. T. // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Vol. 57, no. 13. — P. 1595.
106. Mostovych A. N., Chan Y. Reflective probing of the electrical conductivity of hot aluminum in the solid, liquid, and plasma phases // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 79, no. 25. — P. 5094.
107. Electron-ion equilibration in a strongly coupled plasma / Ng A., Celliers P., Xu G., and Forsman A. // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 52, no. 4. — P. 4299.
108. Спитцер Л. Физика полностью ионизованного газа. — М. : Мир, 1965. — 212 с.
109. X-ray diffraction from a dense plasma / Riley D., Woolsey N. C., McSherry D., Weaver I., Djaoui A., and Nardi E. // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 8. — P. 1704.
110. Modelling of collective Thomson scattering from collisional plasmas / Tierney I V T. E., Montgomery D. S., Benage Jr J. F., Wysocki F. J., and Murillo M. S. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 5981.
111. Ng A. Outstanding questions in electron–ion energy relaxation, lattice stability, and dielectric function of warm dense matter // *Int. J. Quantum Chem.* — 2012. — Vol. 112, no. 1. — P. 150–160.
112. Demonstration of spectrally resolved x-ray scattering in dense plasmas / Glenzer S. H., Gregori G., Lee R. W., Rogers F. J., Pollaine S. W., and Landen O. L. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90, no. 17. — P. 175002.
113. Probing warm dense lithium by inelastic X-ray scattering / Garcia Saiz E., Gregori G., Gericke D. O., Vorberger J., Barbrel B., et al. // *Nat. Phys.* — 2008. — Vol. 4, no. 12. — P. 940–944.
114. Ultrafast x-ray Thomson scattering of shock-compressed matter / Kritcher A. L., Neumayer P., Castor J., Döppner T., Falcone R. W., et al. // *Science.* — 2008. — Vol. 322, no. 5898. — P. 69–71.
115. Glenzer S. H., Redmer R. X-ray Thomson scattering in high energy density plas-

- mas // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81, no. 4. — P. 1625.
116. Plasmons in strongly coupled shock-compressed matter / Neumayer P., Fortmann C., Döppner T., Davis P., Falcone R. W., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 105, no. 7. — P. 075003.
117. X-ray scattering measurements of dissociation-induced metallization of dynamically compressed deuterium / Davis P., Döppner T., Rygg J. R., Fortmann C., Divol L., et al. // *Nat. Commun.* — 2016. — Vol. 7, no. 1. — P. 1–8.
118. Resolving ultrafast heating of dense cryogenic hydrogen / Zastrau U., Sperling P., Harmand M., Becker A., Bornath T., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112, no. 10. — P. 105002.
119. Free-electron x-ray laser measurements of collisional-damped plasmons in isochorically heated warm dense matter / Sperling P., Gamboa E. J., Lee H. J., Chung H. K., Galtier E., Omarbakiyeva Y., Reinholz H., Röpke G., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 115, no. 11. — P. 115001.
120. Measurements of the momentum-dependence of plasmonic excitations in matter around 1 Mbar using an X-ray free electron laser / Preston T. R., Appel K., Brambrink E., Chen B., Fletcher L. B., et al. // *Appl. Phys. Lett.* — 2019. — Vol. 114, no. 1. — P. 014101.
121. Van Thiel M., Alder B. J. Shock compression of liquid hydrogen // *Molecular Physics.* — 1966. — Vol. 10, no. 5. — P. 427–435.
122. Shock-wave compression of liquid deuterium to 0.9 Mbar / Van Thiel M., Ross M., Hord B. L., Mitchell A. C., Gust W. H., d’Addario M. J., Keeler R. N., and Boutwell K. // *Phys. Rev. Lett.* — 1973. — Vol. 31, no. 16. — P. 979.
123. Dick R. D., Kerley G. I. Shock compression data for liquids. II. Condensed hydrogen and deuterium // *J. Chem. Phys.* — 1980. — Vol. 73, no. 10. — P. 5264–5271.
124. Equation-of-state data for molecular hydrogen and deuterium at shock pressures in the range 2–76 GPa (20–760 kbar) / Nellis W. J., Mitchell A. C., Van Thiel M., Devine G. J., Trainor R. J., and Brown N. // *J. Chem. Phys.* — 1983. — Vol. 79, no. 3. — P. 1480–1486.
125. Absolute equation of state measurements on shocked liquid deuterium up to 200 GPa (2 Mbar) / Da Silva L. B., Celliers P., Collins G. W., Budil K. S., Holmes N. C., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78, no. 3. — P. 483.

126. Measurements of the equation of state of deuterium at the fluid insulator-metal transition / Collins G. W., Da Silva L. B., Celliers P., Gold D. M., Foord M. E., et al. // *Science*. — 1998. — Vol. 281, no. 5380. — P. 1178–1181.
127. Kerley G. I. *Molecular-Based Study of Fluids* // *Advances in Chemistry*, V. 204. — Washington DC, USA : American Chemical Society, 1983. — P. 107.
128. Desjarlais M. P. Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Vol. 68, no. 6. — P. 064204.
129. Equation of state measurements in liquid deuterium to 70 GPa / Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E., Hall C. A., Asay J. R., and Anderson W. W. // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 87, no. 22. — P. 225501.
130. Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques / Knudson M. D., Hanson D. L., Bailey J. E., Hall C. A., Asay J. R., and Deeney C. // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 69, no. 14. — P. 144209.
131. Ударно-волновое сжатие твердого дейтерия / Белов С. И., Борисков Г. В., Быков А. И., Илькаев Р. И., Лукьянов Н. Б., Матвеев А. Я., Михайлова О. Л., Селемир В. Д., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф. и др. // *Письма в ЖЭТФ*. — 2002. — Т. 76, № 7. — С. 508–510.
132. Shock compression of liquid deuterium up to 109 GPa / Boriskov G. V., Bykov A. I., Il'kaev R., Selemir V. D., Simakov G. V., Trunin R. F., Urlin V. D., Shuikin A. N., and Nellis W. J. // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 71, no. 9. — P. 092104.
133. Isentropic compression of hydrogen: Probing conditions deep in planetary interiors / Becker A., Nettelmann N., Holst B., and Redmer R. // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88, no. 4. — P. 045122.
134. Hydrogen and deuterium in shock wave experiments, ab initio simulations and chemical picture modeling / Holst B., Redmer R., Gryaznov V. K., Fortov V. E., and Iosilevskiy I. L. // *Eur. Phys. J. D*. — 2012. — Vol. 66, no. 4. — P. 1–6.
135. 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. —

- C. 90–102.
136. Knudson M. D., Desjarlais M. P. High-precision shock wave measurements of deuterium: Evaluation of exchange-correlation functionals at the molecular-to-atomic transition // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Vol. 118, no. 3. — P. 035501.
 137. Shock compression of liquid deuterium up to 1 TPa / Fernandez-Pañella A., Mililot M., Fratanduono D. E., Desjarlais M. P., Hamel S., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — Vol. 122, no. 25. — P. 255702.
 138. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Термодинамика сильно неидеальной плазмы // *ТВТ.* — 1970. — Т. 8, № 2. — С. 413–438.
 139. Phase transition in dense low-temperature molecular gases / Mullenko I. A., Olejnikova E. N., Khomkin A. L., Filinov V. S., Bonitz M., and Fortov V. E. // *Phys. Lett. A.* — 2001. — Vol. 289, no. 3. — P. 141–146.
 140. Phase transition in strongly degenerate hydrogen plasma / Filinov V. S., Fortov V. E., Bonitz M., and Levashov P. R. // *JETP Lett.* — 2001. — Vol. 74, no. 7. — P. 384–387.
 141. Scandolo S. Liquid–liquid phase transition in compressed hydrogen from first-principles simulations // *Proceedings of the National Academy of Sciences.* — 2003. — Vol. 100, no. 6. — P. 3051–3053.
 142. 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.
 143. Lorenzen W., Holst B., Redmer R. First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 82, no. 19. — P. 195107.
 144. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Диссоциация и диссоциативный фазовый переход в плотном водороде // *ЖЭТФ.* — 2012. — Т. 141, № 1. — С. 101–108.
 145. Norman G. E., Saitov I. M., Stegailov V. V. Plasma-Plasma and Liquid-Liquid First-Order Phase Transitions // *Contrib. Plasma Phys.* — 2015. — Vol. 55, no. 2-3. — P. 215–221.
 146. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Новый класс фазовых переходов в водороде и дейтерии при наличии химических реакций ионизации и диссоциации // *ЖЭТФ.* — 2022. — Т. 161, № 2. — С. 238–244.
 147. Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динами-

- ческих давлений / Фортов В. Е., Терновой В. Я., Жерноклетов М. В., Мочалов М. А., Михайлов А. Л., Филимонов А. С., Пяллинг А. А., Минцев В. Б., Грязнов В. К. и Иосилевский И. Л. // *ЖЭТФ*. — 2003. — Т. 124, № 2. — С. 288–309.
148. Electronic energy gap of molecular hydrogen from electrical conductivity measurements at high shock pressures / Nellis W. J., Mitchell A. C., McCandless P. C., Erskine D. J., and Weir S. T. // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Vol. 68, no. 19. — P. 2937.
149. 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.
150. Weir S. T., Mitchell A. C., Nellis W. J. Metallization of fluid molecular hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar) // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76, no. 11. — P. 1860.
151. Thermodynamic properties and electrical conductivity of hydrogen under multiple shock compression to 150 GPa / Ternovoi V. Y., Filimonov A. S., Fortov V. E., Kvitov S. V., Nikolaev D. N., and Pyalling A. A. // *Phys. B*. — 1999. — Vol. 265, no. 1-4. — P. 6–11.
152. 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.
153. Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium / Knudson M. D., Desjarlais M. P., Becker A., Lemke R. W., Cochrane K. R., Savage M. E., Bliss D. E., Mattsson T. R., and Redmer R. // *Science*. — 2015. — Vol. 348, no. 6242. — P. 1455–1460.
154. Insulator-metal transition in dense fluid deuterium / Celliers P. M., Millot M., Brygoo S., McWilliams R. S., Fratanduono D. E., et al. // *Science*. — 2018. — Vol. 361, no. 6403. — P. 677–682.
155. Silvera I. F., Dias R. Phases of the hydrogen isotopes under pressure: metallic hydrogen // *Advances in Physics: X*. — 2021. — Vol. 6, no. 1. — P. 1961607.
156. Desjarlais M. P., Knudson M. D., Redmer R. Thermodynamics of the insula-

- tor-metal transition in dense liquid deuterium // *Phys. Rev. B.* — 2020. — Vol. 101, no. 10. — P. 104101.
157. Equation of state for hydrogen below 10000 K: From the fluid to the plasma / Beule D., Ebeling W., Förster A., Juránek H., Nagel S., Redmer R., and Röpke G. // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59, no. 22. — P. 14177.
158. Evidence for supercritical behaviour of high-pressure liquid hydrogen / Cheng B., Mazzola G., Pickard C. J., and Ceriotti M. // *Nature.* — 2020. — Vol. 585, no. 7824. — P. 217–220.
159. Thermodynamic anomalies and three distinct liquid-liquid transitions in warm dense liquid hydrogen / Geng H. Y., Wu Q., Marqués M., and Ackland G. J. // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Vol. 100, no. 13. — P. 134109.
160. Измерение сжимаемости дейтериевой плазмы при давлении 1800 ГПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Макаров Ю. М. и др. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2010. — Т. 92, № 5. — С. 336–340.
161. Квазиизэнтропическое сжатие плотного газообразного гелия в области давлений до 500 ГПа / Жерноклетов М. В., Грязнов В. К., Аринин В. А., Бузин В. Н., Давыдов Н. Б. и др. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2012. — Т. 96, № 7. — С. 479–483.
162. Квазиизэнтропическая сжимаемость дейтерия в области давлений ~ 12 ТПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Аринин В. А., Бликов А. О., Комраков В. А., Максимкин И. П., Огородников В. А. и Рыжков А. В. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2018. — Т. 107, № 3. — С. 173–179.
163. Analysis of Zero-Point Isotherm of Hydrogen Isotopes in the Ultrahigh Pressure Range / Boriskov G. V., Bykov A. I., Egorov N. I., Zhernokletov M. V., Pavlov V. N., et al. // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2020. — Vol. 130, no. 2. — P. 183–197.
164. Thermodynamic properties and electrical conductivity of strongly correlated plasma media / Filinov V. S., Levashov P. R., Bořan A. V., Bonitz M., and Fortov V. E. // *J. Phys. A.* — 2009. — Vol. 42, no. 21. — P. 214002.
165. Измерение квазиизэнтропической сжимаемости гелия и дейтерия при давлениях 1500-2000 ГПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Макаров Ю. М. и др. // *ЖЭТФ.* — 2012. — Т. 142, № 4. —

- С. 696–709.
166. Исследование квазиизэнтропической сжимаемости дейтерия и гелия при давлениях 1500-5000 ГПа / Мочалов М. А., Илькаев Р. П., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Раевский В. А. и др. // ЖЭТФ. — 2014. — Т. 146, № 1. — С. 169–185.
 167. Квазиизэнтропическая сжимаемость сильнонеидеальной плазмы дейтерия при давлениях до 5500 ГПа: эффекты неидеальности и вырождения / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Бликов А. О., Огородников В. А., Грязнов В. К. и Иосилевский И. Л. // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 151, № 3. — С. 592–620.
 168. Термодинамические параметры гелия при ударно-волновом и квазиизэнтропическом сжатиях в области давлений до 4800 ГПа и при степенях сжатий ДО 900 / Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Михайлов А. Л., Аринин В. А., Бликов А. О. и др. // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 152, № 5. — С. 1113–1130.
 169. Dynamics of supernova bounce in laboratory / Blinnikov S. I., Ilkaev R. I., Mochalov M. A., Mikhailov A. L., Iosilevskiy I. L., et al. // Phys. Rev. E. — 2019. — Vol. 99, no. 3. — P. 033102.
 170. 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.
 171. 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.
 172. Perry M. D., Mourou G. Terawatt to petawatt subpicosecond lasers // Science. — 1994. — Vol. 264, no. 5161. — P. 917–924.
 173. Gibbon P., Förster E. Short-pulse laser-plasma interactions // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 1996. — Vol. 38, no. 6. — P. 769.
 174. Nonlinear increase of X-ray intensities from thin foils irradiated with a 200 TW femtosecond laser / Faenov A. Y., Colgan J., Hansen S. B., Zhidkov A., Pikuz T. A., et al. // Sci. Rep. — 2015. — Vol. 5, no. 1. — P. 1–13.
 175. Ильина И. В., Ситников Д. С., Агранат М. Б. Современное состояние исследо-

- ваний влияния терагерцового излучения на живые биологические системы // ТВТ. — 2018. — Т. 56, № 5. — С. 814–837.
176. Quantitative phase contrast imaging of a shock-wave with a laser-plasma based X-ray source / Barbato F., Atzeni S., Batani D., Bleiner D., Boutoux G., et al. // *Sci. Rep.* — 2019. — Vol. 9, no. 1. — P. 1–11.
177. Interaction of relativistically intense laser pulses with long-scale near critical plasmas for optimization of laser based sources of MeV electrons and gamma-rays / Rosmej O. N., Andreev N. E., Zaechter S., Zahn N., Christ P., et al. // *New J. Phys.* — 2019. — Vol. 21, no. 4. — P. 043044.
178. Генерация гамма-излучения субтераваттным сверхкоротким лазерным импульсом: оптимизация преплазмы и длительности импульса / Шуляпов С. А., Цымбалов И. Н., Иванов К. А., Господинов Г. А., Волков Р. В., Быченков В. Ю. и Савельев-Трофимов А. Б. // *Квантовая электроника.* — 2020. — Т. 50, № 4. — С. 335–342.
179. Анисимов С. И., Капелиович Б. Л., Перельман Т. Л. Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов // *ЖЭТФ.* — 1974. — Т. 66, № 2. — С. 776–781.
180. Воробьев В. С. Плазма, возникающая при взаимодействии лазерного излучения с твердыми мишенями // *УФН.* — 1993. — Т. 163, № 12. — С. 51.
181. Гинзбург В. Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. — 3-е изд. — М. : URSS, 2015. — 688 с.
182. Gibbon P. Short pulse laser interactions with matter: an introduction. — London, UK : Imperial College Press, 2005. — 308 p.
183. Brunel F. Anomalous absorption of high intensity subpicosecond laser pulses // *Physics of Fluids.* — 1988. — Vol. 31, no. 9. — P. 2714–2719.
184. Experimental Identification of “Vacuum Heating” at Femtosecond-Laser-Irradiated Metal Surfaces / Grimes M. K., Rundquist A. R., Lee Y.-S., and Downer M. C. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — P. 4010–4013.
185. Vacuum laser acceleration of relativistic electrons using plasma mirror injectors / Thévenet M., Leblanc A., Kahaly S., Vincenti H., Vernier A., Quéré F., and Faure J. // *Nat. Phys.* — 2016. — Vol. 12, no. 4. — P. 355–360.
186. Interband and intraband (Drude) contributions to femtosecond laser absorption in

- aluminum / Fisher D., Fraenkel M., Henis Z., Moshe E., and Eliezer S. // *Phys. Rev. E*. — 2001. — Vol. 65, no. 1. — P. 016409.
187. Определение транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы твердотельной плотности при фемтосекундном лазерном воздействии / Агранат М. Б., Андреев Н. Е., Ашитков С. И., Вейсман М. Е., Левашов П. Р., Овчинников А. В., Ситников Д. С., Фортов В. Е. и Хищенко К. В. // *Письма в ЖЭТФ*. — 2007. — Т. 85, № 6. — С. 328–333.
188. Femtosecond optical diagnostics and hydrodynamic simulation of Ag plasma created by laser irradiation of a solid target / Veysman M. E., Agranat M. B., Andreev N. E., Ashitkov S. I., Fortov V. E., Khishchenko K. V., Kostenko O. F., Levashov P. R., Ovchinnikov A. V., and Sitnikov D. S. // *Phys. Lett. B*. — 2008. — Vol. 41, no. 12. — P. 125704.
189. Experimental and theoretical study of Al plasma under femtosecond laser pulses / Komarov P. S., Ashitkov S. I., Ovchinnikov A. V., Sitnikov D. S., Veysman M. E., et al. // *J. Phys. A*. — 2009. — Vol. 42, no. 21. — P. 214057.
190. Interaction of annular-focused laser beams with solid targets / Andreev N. E., Povarnitsyn M. E., Veysman M. E., Faenov A. Y., Levashov P. R., et al. // *Laser Part. Beams*. — 2015. — Vol. 33, no. 3. — P. 541–550.
191. Dynamics of thin metal foils irradiated by moderate-contrast high-intensity laser beams / Povarnitsyn M. E., Andreev N. E., Levashov P. R., Khishchenko K. V., and Rosmej O. N. // *Phys. Plasmas*. — 2012. — Vol. 19, no. 2. — P. 023110.
192. Sitnikov D. S. Time-resolved interference microscopy for studying nonideal plasma formed by high-power femtosecond laser pulses // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2019. — Vol. 1421. — P. 012001.
193. Генерация плотной горячей плазмы интенсивными субпикосекундными лазерными импульсами / Андреев Н. Е., Вейсман М. Е., Ефремов В. П. и Фортов В. Е. // *ТВТ*. — 2003. — Т. 41, № 5. — С. 679–694.
194. Laser irradiation of thin films: Effect of energy transformation / Povarnitsyn M. E., Andreev N. E., Levashov P. R., Khishchenko K. V., Kim D. A., Novikov V. G., and Rosmej O. N. // *Laser Part. Beams*. — 2013. — Vol. 31, no. 4. — P. 663–671.
195. Levashov P. R., Khishchenko K. V. Tabular multiphase equations of state for metals and their applications // *AIP Conf. Proc.* — 2007. — Vol. 955, no. 1. —

- P. 59–62.
196. Khishchenko K. V. Equation of state and phase diagram of tin at high pressures // *J. Phys. Conf. Ser.* — 2008. — Vol. 121, no. 2. — P. 022025.
 197. Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter / Eidmann K., Meyer-ter Vehn J., Schlegel T., and Hüller S. // *Phys. Rev. E.* — 2000. — Vol. 62, no. 1. — P. 1202.
 198. Semkat D., Redmer R., Bornath T. Collisional absorption in aluminum // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 73, no. 6. — P. 066406.
 199. An experiment to measure the electron–ion thermal equilibration rate in a strongly coupled plasma / Taccetti J. M., Shurter R. P., Roberts J. P., Benage J. F., Graden B., et al. // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4347.
 200. Molecular Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Equilibration in an SF₆ Plasma / Benedict L. X., Glosli J. N., Richards D. F., Streitz F. H., Nau-Riege S. P., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 205004.
 201. Гуськов С. Ю., Розанов В. Б. Взаимодействие лазерного излучения с пористой средой и образование неравновесной плазмы // *Квантовая электроника.* — 1997. — Т. 24, № 8. — С. 715–720.
 202. Генерация жесткого рентгеновского излучения при облучении пористого кремния сверхинтенсивными фемтосекундными лазерными импульсами / Волков Р. В., Гордиенко В. М., Джиджоев М. С., Каменев Б. В., Кашкаров П. К. и др. // *Квантовая электроника.* — 1998. — Т. 25, № 1. — С. 3–4.
 203. Ion generation in a low-density plastic foam by interaction with intense femtosecond laser pulses / Okihara S., Esirkepov T. Z., Nagai K., Shimizu S., Sato F., et al. // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 69, no. 2. — P. 026401.
 204. Nagai K., Musgrave C. S. A., Nazarov W. A review of low density porous materials used in laser plasma experiments // *Phys. Plasmas.* — 2018. — Vol. 25, no. 3. — P. 030501.
 205. Efficient coupling of high-intensity subpicosecond laser pulses into solids / Murnane M. M., Kapteyn H. C., Gordon S. P., Bokor J., Glytsis E. N., and Falcone R. W. // *Appl. Phys. Lett.* — 1993. — Vol. 62, no. 10. — P. 1068–1070.
 206. X rays from microstructured targets heated by femtosecond lasers / Gordon S. P., Donnelly T., Sullivan A., Hamster H., and Falcone R. W. // *Opt. Lett.* — 1994. —

- Vol. 19, no. 7. — P. 484–486.
207. Laser-driven proton acceleration enhancement by nanostructured foils / Margarone D., Klimo O., Kim I. J., Prokūpek J., Limpouch J., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 109, no. 23. — P. 234801.
208. Energy penetration into arrays of aligned nanowires irradiated with relativistic intensities: Scaling to terabar pressures / Bargsten C., Hollinger R., Capeluto M. G., Kaymak V., Pukhov A., et al. // *Sci. Adv.* — 2017. — Vol. 3, no. 1. — P. e1601558.
209. Transition from Coherent to Stochastic electron heating in ultrashort relativistic laser interaction with structured targets / Cristoforetti G., Londrillo P., Singh P. K., Baffigi F., D'Arrigo G., et al. // *Sci. Rep.* — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 1–8.
210. Генерация рентгеновского излучения и ускорение заряженных частиц при воздействии мощного фемтосекундного лазерного импульса на массив микро-и наностолбиков / Иванов К. А., Мордвинцев И. М., Каргина Ю. В., Шуляпов С. А., Цымбалов И. Н., Божьев И. В., Волков Р. В., Тимошенко В. Ю. и Савельев-Трофимов А. Б. // *Квантовая электроника.* — 2021. — Т. 51, № 6. — С. 536–543.
211. Управление свойствами и диагностика фемтосекундной плотной плазмы с использованием модифицированных мишеней / Волков Р. В., Гордиенко В. М., Джиджоев М. С., Жуков М. А., Михеев П. М., Савельев-Трофимов А. Б. и Шашков А. А. // *Квантовая электроника.* — 1997. — Т. 24, № 12. — С. 1114–1126.
212. Перегретая плазма на поверхности мишени с периодической структурой, индуцированной фемтосекундным лазерным излучением / Волков Р. В., Голишников Д. М., Гордиенко В. М. и Савельев А. Б. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2003. — Т. 77, № 9. — С. 568–571.
213. Крайнов В. П., Смирнов М. Б. Эволюция больших кластеров под действием ультракороткого сверхмощного лазерного импульса // *УФН.* — 2000. — Т. 170, № 9. — С. 969–990.
214. Saalman U., Siedschlag C., Rost J. M. Mechanisms of cluster ionization in strong laser pulses // *Phys. Lett. B.* — 2006. — Vol. 39, no. 4. — P. R39.
215. Крайнов В. П., Смирнов Б. М., Смирнов М. Б. Фемтосекундное возбуждение кластерных пучков // *УФН.* — 2007. — Т. 177, № 9. — С. 953–981.

216. Evidence for coherent electron motions in multiphoton X-ray production from Kr and Xe clusters / Boyer K., Thompson B. D., McPherson A., and Rhodes C. K. // *Phys. Lett. B.* — 1994. — Vol. 27, no. 18. — P. 4373.
217. Ultrahigh power compression for X-ray amplification: multiphoton cluster excitation combined with nonlinear channelled propagation / Borisov A. B., McPherson A., Thompson B. D., Boyer K., and Rhodes C. K. // *Phys. Lett. B.* — 1995. — Vol. 28, no. 11. — P. 2143.
218. Interaction of intense laser pulses with atomic clusters / Ditmire T., Donnelly T., Rubenchik A. M., Falcone R. W., and Perry M. D. // *Phys. Rev. A.* — 1996. — May. — Vol. 53. — P. 3379–3402.
219. Explosion of atomic clusters heated by high-intensity femtosecond laser pulses / Ditmire T., Springate E., Tisch J. W. G., Shao Y. L., Mason M. B., et al. // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 57, no. 1. — P. 369.
220. Zweiback J., Ditmire T., Perry M. D. Femtosecond time-resolved studies of the dynamics of noble-gas cluster explosions // *Phys. Rev. A.* — 1999. — May. — Vol. 59. — P. R3166–R3169.
221. Explosion of atomic clusters irradiated by high-intensity laser pulses: Scaling of ion energies with cluster and laser parameters / Springate E., Hay N., Tisch J. W. G., Mason M. B., Ditmire T., Hutchinson M. H. R., and Marangos J. P. // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61, no. 6. — P. 063201.
222. Kumarappan V., Krishnamurthy M., Mathur D. Asymmetric emission of high-energy electrons in the two-dimensional hydrodynamic expansion of large xenon clusters irradiated by intense laser fields // *Phys. Rev. A.* — 2003. — Vol. 67, no. 4. — P. 043204.
223. Time-resolved explosion of intense-laser-heated clusters / Kim K. Y., Alexeev I., Parra E., and Milchberg H. M. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90, no. 2. — P. 023401.
224. Mikaberidze A., Saalman U., Rost J. M. Laser-driven nanoplasmas in doped helium droplets: Local ignition and anisotropic growth // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102, no. 12. — P. 128102.
225. Dopant-induced ignition of helium nanodroplets in intense few-cycle laser pulses / Krishnan S. R., Fechner L., Kremer M., Sharma V., Fischer B., et al. // *Phys. Rev.*

- Lett. — 2011. — Vol. 107, no. 17. — P. 173402.
226. Evolution of dopant-induced helium nanoplasmas / Krishnan S. R., Peltz C., Fehner L., Sharma V., Kremer M., et al. // *New J. Phys.* — 2012. — Vol. 14, no. 7. — P. 075016.
227. Костенко О. Ф., Андреев Н. Е. Нагрев и ионизация металлических кластеров полем интенсивного фемтосекундного лазерного импульса // *Физика плазмы.* — 2007. — Т. 33, № 6. — С. 556–562.
228. Laser-driven nonlinear cluster dynamics / Fennel T., Meiwes-Broer K.-H., Tiggesbäumker J., Reinhard P.-G., Dinh P. M., and Suraud E. // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82. — P. 1793–1842.
229. Sofronov A. V., Krainov V. P. X-ray generation by electron photo-recombination in charged atomic clusters formed in intense femtosecond laser pulses // *J. Phys. B.* — 2013. — Vol. 46, no. 1. — P. 015601.
230. Смирнов М. Б. Спектр ионов при возбуждении кластерного пучка лазерным импульсом // *ЖЭТФ.* — 2014. — Т. 146, № 3. — С. 420–428.
231. Electron acceleration via high contrast laser interacting with submicron clusters / Zhang L., Chen L.-M., Wang W.-M., Yan W.-C., Yuan D.-W., et al. // *Appl. Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 100, no. 1. — P. 014104–014104–3.
232. Electron acceleration up to MeV level under nonlinear interaction of subterawatt femtosecond laser chirped pulses with Kr clusters / Zhvaniya I. A., Ivanov K. A., Semenov T. A., Dzhidzhoev M. S., Volkov R. V., Tsymbalov I. N., Savel'ev A. B., and Gordienko V. M. // *Laser Phys. Lett.* — 2019. — Vol. 16, no. 11. — P. 115401.
233. Micron-size hydrogen cluster target for laser-driven proton acceleration / Jinno S., Kanasaki M., Uno M., Matsui R., Uesaka M., Kishimoto Y., and Fukuda Y. // *Plasma Phys. Controlled Fusion.* — 2018. — Vol. 60, no. 4. — P. 044021.
234. Submicron ionography of nanostructures using a femtosecond-laser-driven-cluster-based source / Faenov A., Pikuz T. A., Fukuda Y., Kando M., Kotaki H., et al. // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 10. — P. 101107–101107–3.
235. Faenov A., Pikuz T., Kodama R. High resolution ion and electron beam radiography with laser-driven clustered sources // *Laser-Driven Particle Acceleration Towards Radiobiology and Medicine.* — Switzerland : Springer, 2016. — P. 271–294.

236. Neutron enhancement from laser interaction with a critical fluid / Quevedo H. J., Zhang G., Bonasera A., Donovan M., Dyer G., et al. // *Phys. Lett. A.* — 2018. — Vol. 382, no. 2-3. — P. 94–98.
237. Influence of Xe and Kr impurities on x-ray yield from debris-free plasma x-ray sources with an Ar supersonic gas jet irradiated by femtosecond near-infrared-wavelength laser pulses / Kantsyrev V. L., Schultz K. A., Shlyaptseva V. V., Petrov G. M., Safronova A. S., et al. // *Phys. Rev. E.* — 2016. — Vol. 94, no. 5. — P. 053203.
238. Femtosecond probing of sodium cluster ion $\text{Na } n^+$ fragmentation / Baumert T., Röttgermann C., Rothenfuß C., Thalweiser R., Weiss V., and Gerber G. // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Vol. 69, no. 10. — P. 1512.
239. Charging dynamics of metal clusters in intense laser fields / Döppner T., Teuber S., Schumacher M., Tiggesbäumker J., and Meiwes-Broer K. H. // *Appl. Phys. B.* — 2000. — Vol. 71, no. 3. — P. 357–360.
240. Dynamics of free and embedded lead clusters in intense laser fields / Döppner T., Teuber S., Diederich T., Fennel T., Radcliffe P., Tiggesbäumker J., and Meiwes-Broer K. H. // *Eur. Phys. J. D.* — 2003. — Vol. 24, no. 1. — P. 157–160.
241. Controlling the Coulomb explosion of silver clusters by femtosecond dual-pulse laser excitation / Döppner T., Fennel T., Diederich T., Tiggesbäumker J., and Meiwes-Broer K. H. // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 1. — P. 013401.
242. 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.
243. Plasmon-Enhanced Electron Acceleration in Intense Laser Metal-Cluster Interactions / Fennel T., Döppner T., Passig J., Schaal C., Tiggesbäumker J., and Meiwes-Broer K.-H. // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98. — P. 143401.
244. Observation and control of shock waves in individual nanoplasmas / Hickstein D. D., Dollar F., Gaffney J. A., Foord M. E., Petrov G. M., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112, no. 11. — P. 115004.
245. Femtosecond and nanometre visualization of structural dynamics in superheated nanoparticles / Gorkhover T., Schorb S., Coffee R., Adolph M., Foucar L., et al. // *Nature Photonics.* — 2016. — Vol. 10, no. 2. — P. 93–97.

246. Few-femtosecond resolved imaging of laser-driven nanoplasma expansion / Peltz C., Powell J. A., Rupp P., Summers A., Gorkhover T., et al. // *New J. Phys.* — 2022. — Vol. 24, no. 4. — P. 043024.
247. Time-resolved x-ray imaging of anisotropic nanoplasma expansion / Peltz C., Varin C., Brabec T., and Fennel T. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 113, no. 13. — P. 133401.
248. Isochoric heating of solid-density matter with an ultrafast proton beam / Patel P. K., Mackinnon A. J., Key M. H., Cowan T. E., Foord M. E., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 12. — P. 125004.
249. Equation-of-state measurement of dense plasmas heated with fast protons / Dyer G. M., Bernstein A. C., Cho B. I., Osterholz J., Grigsby W., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, no. 1. — P. 015002.
250. Equation of state studies of warm dense matter samples heated by laser produced proton beams / Hoarty D. J., Guymer T., James S. F., Gumbrell E., Brown C. R. D., Hill M., Morton J., and Doyle H. // *High Energy Density Phys.* — 2012. — Vol. 8, no. 1. — P. 50–54.
251. Direct evidence of strongly inhomogeneous energy deposition in target heating with laser-produced ion beams / Brambrink E., Schlegel T., Malka G., Amthor K. U., Aléonard M. M., et al. // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 75, no. 6. — P. 065401.
252. Visualization of expanding warm dense gold and diamond heated rapidly by laser-generated ion beams / Bang W., Albright B. J., Bradley P. A., Gautier D. C., Palaniyappan S., et al. // *Sci. Rep.* — 2015. — Vol. 5, no. 1. — P. 1–7.
253. Present and future perspectives for high energy density physics with intense heavy ion and laser beams / Hoffmann D. H. H., Blazevic A., Ni P., Rosmej O., Roth M., et al. // *Laser Part. Beams.* — 2005. — Vol. 23, no. 1. — P. 47–53.
254. Survey of theoretical work for the proposed HEDgeHOB experimental schemes: HIHEX and LAPLAS / Tahir N. A., Piriz A. R., Shutov A., Lomonosov I. V., Gryaznov V., et al. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2007. — Vol. 47, no. 4-5. — P. 223–233.
255. The Large Hadron Collider and the Super Proton Synchrotron at CERN as Tools to Generate Warm Dense Matter and Non-Ideal Plasmas / Tahir N. A., Schmidt R.,

- Shutov A., Lomonosov I. V., Gryaznov V., Piriz A. R., Deutsch C., and Fortov V. E. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2011. — Vol. 51, no. 4. — P. 299–308.
256. Non-Ideal Plasma and Early Experiments at FAIR: HIHEX-Heavy Ion Heating and EXpansion / Mintsev V., Kim V., Lomonosov I., Nikolaev D., Ostriker A., et al. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2016. — Vol. 56, no. 3-4. — P. 281–285.
257. Investigation of the projectile ion velocity inside the interaction media by the x-ray spectromicroscopy method / Rosmej O. N., Pikuz Jr S. A., Wieser J., Blazevic A., Brambrink E., et al. // *Rev. Sci. Instrum.* — 2003. — Vol. 74, no. 12. — P. 5039–5045.
258. Charge state and stopping dynamics of fast heavy ions in dense matter / Rosmej O. N., Blazevic A., Korostiy S., Bock R., Hoffmann D. H. H., Pikuz Jr S. A., Efremov V. P., Fortov V. E., et al. // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72, no. 5. — P. 052901.
259. 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.
260. Creation of an ultracold neutral plasma / Killian T. C., Kulin S., Bergeson S. D., Orozco L. A., Orzel C., and Rolston S. L. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83, no. 23. — P. 4776.
261. Plasma oscillations and expansion of an ultracold neutral plasma / Kulin S., Killian T. C., Bergeson S. D., and Rolston S. L. // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85, no. 2. — P. 318.
262. Formation of Rydberg atoms in an expanding ultracold neutral plasma / Killian T. C., Lim M. J., Kulin S., Dumke R., Bergeson S. D., and Rolston S. L. // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 86, no. 17. — P. 3759.
263. Electron screening and kinetic-energy oscillations in a strongly coupled plasma / Chen Y. C., Simien C. E., Laha S., Gupta P., Martinez Y. N., et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, no. 26. — P. 265003.
264. Bergeson S. D., Robicheaux F. Recombination fluorescence in ultracold neutral plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, no. 7. — P. 073202.
265. Creating and studying ion acoustic waves in ultracold neutral plasmas / Kil-

- lian T. C., McQuillen P., O'Neil T. M., and Castro J. // *Phys. Plasmas*. — 2012. — Vol. 19, no. 5. — P. 055701.
266. Experimental measurement of self-diffusion in a strongly coupled plasma / Strickler T. S., Langin T. K., McQuillen P., Daligault J., and Killian T. C. // *Phys. Rev. X*. — 2016. — Vol. 6, no. 2. — P. 021021.
267. Huckel E., Debye P. Zur theorie der elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte erscheinungen // *Phys. Z.* — 1923. — Vol. 24. — P. 185–206.
268. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 т. — 6-е, испр. изд. — М. : Физматлит, 2021. — Т. V. Статистическая физика. Часть 1. — 620 с.
269. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Особенности поведения химических моделей неидеальной атомарной плазмы при высоких температурах // *Физика плазмы*. — 2008. — Т. 34, № 3. — С. 281–286.
270. Uhlenbeck G. E., Beth E. The quantum theory of the non-ideal gas I. Deviations from the classical theory // *Physica*. — 1936. — Vol. 3, no. 8. — P. 729–745.
271. Beth E., Uhlenbeck G. E. The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures // *Physica*. — 1937. — Vol. 4, no. 10. — P. 915–924.
272. Веденов А. А., Ларкин А. И. Уравнение состояния плазмы // *ЖЭТФ*. — 1959. — Т. 36. — С. 1133–1138.
273. Ларкин А. И. Термодинамические функции низкотемпературной плазмы // *ЖЭТФ*. — 1960. — Т. 38. — С. 1896–1897.
274. Эккер Г. Теория полностью ионизованной плазмы: Пер. с англ. — М. : Мир, 1974. — 432 с.
275. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Трехкомпонентная химическая модель неидеальной плазмы «для пользователей» // *ТВТ*. — 2021. — Т. 59, № 1. — С. 3–11.
276. Волокитин В. С., Калиткин Н. Н. Модели статистических сумм атомов и молекул // *Математическое моделирование*. — 1991. — Т. 3, № 5. — С. 49–60.
277. Старостин А. Н., Рерих В. К. Сходящееся уравнение состояния слабонеидеальной плазмы водорода без таинств // *ЖЭТФ*. — 2005. — Т. 127, № 1. — С. 186–219.
278. Ликальтер А. А. Взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме // *ЖЭТФ*. — 1969. — Т. 56, № 1. — С. 240–245.

279. Roepke G., Wierling A. Dielectric function of a two-component plasma including collisions // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 57, no. 6. — P. 7075.
280. Reinholz H. A generalised linear response theory applied to the dielectric function of Coulomb systems // *Aust. J. Phys.* — 2000. — Vol. 53, no. 1. — P. 133–156.
281. Long-wavelength limit of the dynamical local-field factor and dynamical conductivity of a two-component plasma / Reinholz H., Redmer R., Röpke G., and Wierling A. // *Phys. Rev. E.* — 2000. — Vol. 62, no. 4. — P. 5648.
282. Dynamic collision frequency for a two-component plasma / Millat T., Selchow A., Wierling A., Reinholz H., Redmer R., and Röpke G. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 6259.
283. Dynamic structure factor for a two-component model plasma / Selchow A., Röpke G., Wierling A., Reinholz H., Pschiwul T., and Zwicknagel G. // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 64, no. 5. — P. 056410.
284. Inverse bremsstrahlung of hot, weakly coupled plasmas / Wierling A., Millat T., Röpke G., Redmer R., and Reinholz H. // *Phys. Plasmas.* — 2001. — Vol. 8, no. 8. — P. 3810–3819.
285. 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.
286. Redmer R., Röpke G. Progress in the theory of dense strongly coupled plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* — 2010. — Vol. 50, no. 10. — P. 970–985.
287. Conductivity of warm dense matter including electron-electron collisions / Reinholz H., Röpke G., Rosmej S., and Redmer R. // *Physical Review E.* — 2015. — Vol. 91, no. 4. — P. 043105.
288. Каклюгин А. С., Норман Г. Э. Электропроводность недебаевской плазмы // *ТВТ.* — 1973. — Т. 11, № 2. — С. 238–244.
289. Воробьев В. С., Хомкин А. Л. Электрон-ионные коррелированные пары в плазме и их влияние на электропроводность // *ТВТ.* — 1977. — Т. 15, № 1. — С. 188.
290. Валуев А. А., Куриленков Ю. К. Электропроводность плазмы в широком диапазоне плотностей зарядов // *ТВТ.* — 1983. — Т. 21, № 3. — С. 591–594.
291. Kurilenkov Y. K., Valuev A. A. The electrical conductivity of plasma in wide

- range of charge densities // *Beiträge aus der Plasmaphysik*. — 1984. — Vol. 24, no. 3. — P. 161–171.
292. Starrett C. E. Coulomb log for conductivity of dense plasmas // *Physics of Plasmas*. — 2018. — Vol. 25, no. 9. — P. 092707.
293. Khrapak S. A., Khrapak A. G. On the conductivity of moderately non-ideal completely ionized plasma // *Results Phys*. — 2020. — Vol. 17. — P. 103163.
294. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Проводимость газов и плазмы от Спитцера до Займана—для пользователей // *Вестник ОИВТ*. — 2021. — Т. 6. — С. 4–10.
295. Nonlinear collisional absorption in dense laser plasmas / Bornath T., Schlanges M., Hilse P., and Kremp D. // *Phys. Rev. E*. — 2001. — Vol. 64, no. 2. — P. 026414.
296. Collisional absorption of dense plasmas in strong laser fields: Quantum statistical results and simulation / Hilse P., Schlanges M., Bornath T., and Kremp D. // *Phys. Rev. E*. — 2005. — Vol. 71, no. 5. — P. 056408.
297. Baus M., Hansen J.-P. Statistical mechanics of simple Coulomb systems // *Phys. Rep.* — 1980. — Vol. 59, no. 1. — P. 1–94.
298. Ichimaru S. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids // *Rev. Mod. Phys.* — 1982. — Vol. 54, no. 4. — P. 1017.
299. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // *ТВТ*. — 1968. — Т. 6, № 3. — С. 410–415.
300. Kelbg G. Quantenstatistik der Gase mit Coulomb-Wechselwirkung // *Ann. Phys.* — 1963. — Vol. 467, no. 7-8. — P. 354–360.
301. Deutsch C. Nodal expansion in a real matter plasma // *Phys. Lett. A*. — 1977. — Vol. 60, no. 4. — P. 317–318.
302. Deutsch C., Gombert M. M., Mino H. Classical modelization of symmetry effects in the dense high-temperature electron gas // *Phys. Lett. A*. — 1978. — Vol. 66, no. 5. — P. 381–382.
303. Deutsch C., Gombert M. M., Mino H. Classical modelization of symmetry effects in the dense high-temperature electron gas: errata // *Phys. Lett. A*. — 1979. — Vol. 72. — P. 481–481.
304. Mino H., Gombert M. M., Deutsch C. Temperature-dependent Coulomb interactions in hydrogenic systems // *Phys. Rev. A*. — 1981. — Vol. 23, no. 2. — P. 924.

305. Barker A. A. Effective potentials between the components of a hydrogenous plasma // *J. Chem. Phys.* — 1971. — Vol. 55, no. 4. — P. 1751–1759.
306. Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. К статистической теории неидеальной плазмы // *ТВТ.* — 1972. — Т. 10, № 6. — С. 1160–1170.
307. 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.
308. Wagenknecht H., Ebeling W., Förster A. Effective Potentials, Energies, and Pair-distribution Functions of Plasmas by Monte-Carlo Simulations // *Contrib. Plasma Phys.* — 2001. — Vol. 41, no. 1. — P. 15–25.
309. Filinov A. V., Bonitz M., Ebeling W. Improved Kelbg potential for correlated Coulomb systems // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 5957.
310. Temperature-dependent quantum pair potentials and their application to dense partially ionized hydrogen plasmas / Filinov A. V., Golubnychiy V. O., Bonitz M., Ebeling W., and Dufty J. W. // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 70, no. 4. — P. 046411.
311. The method of effective potentials in the quantum-statistical theory of plasmas / Ebeling W., Filinov A., Bonitz M., Filinov V., and Pohl T. // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4309.
312. Zwicknagel G., Pschiwul T. Dynamic response of two-component model plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* — 2003. — Vol. 43, no. 5-6. — P. 393–397.
313. A molecular dynamics description of clusters in strong laser fields / Belkacem M., Megi F., Reinhard P.-G., Suraud E., and Zwicknagel G. // *Eur. Phys. J. D.* — 2006. — Vol. 40, no. 2. — P. 247–255.
314. Hellmann H. A new approximation method in the problem of many electrons // *J. Chem. Phys.* — 1935. — Vol. 3, no. 1. — P. 61–61.
315. Ramazanov T. S., Moldabekov Z. A., Gabdullin M. T. Effective potentials of interactions and thermodynamic properties of a nonideal two-temperature dense plasma // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Vol. 92, no. 2. — P. 023104.
316. Ebeling W. Coulomb interaction and ionization equilibrium in partially ionized plasmas // *Physica.* — 1969. — Vol. 43, no. 2. — P. 293–306.
317. Hummer D. G., Mihalas D. The equation of state for stellar envelopes. I-an oc-

- cupation probability formalism for the truncation of internal partition functions // *Astrophysical J.* — 1988. — Vol. 331. — P. 794–814.
318. Saumon D., Chabrier G. Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization // *Phys. Rev. A.* — 1992. — Vol. 46, no. 4. — P. 2084.
319. Potekhin A. Y. Ionization equilibrium of hot hydrogen plasma // *Phys. Plasmas.* — 1996. — Vol. 3, no. 11. — P. 4156–4165.
320. Хомкин А. Л., Муленко И. А. Свободная энергия неидеальной атомарной плазмы // *ТВТ.* — 2003. — Т. 41, № 3. — С. 327–333.
321. Хомкин А. Л., Муленко И. А., Шумихин А. С. Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // *ТВТ.* — 2004. — Т. 42, № 6. — С. 835–842.
322. Ebeling W., Richert W. Plasma phase transition in hydrogen // *Phys. Lett. A.* — 1985. — Vol. 108, no. 2. — P. 80–82.
323. Iosilevskiy I. L. Entropic phase transitions and accompanying anomalous thermodynamics of matter // *J. Phys. Conf. Ser.* — 2015. — Vol. 653, no. 1. — P. 012077.
324. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Аномальная сжимаемость и металлизация дейтерия и водорода при высоких давлениях // *ЖЭТФ.* — 2014. — Т. 146, № 3. — С. 518–524.
325. Juranek H., Redmer R. Self-consistent fluid variational theory for pressure dissociation in dense hydrogen // *J. Chem. Phys.* — 2000. — Vol. 112, no. 8. — P. 3780–3786.
326. 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.
327. Gryaznov V. K., Iosilevskiy I. L., Fortov V. E. Thermodynamics of hydrogen and helium plasmas in megabar and multi-megabar pressure range under strong shock and isentropic compression // *Plasma Phys. Controlled Fusion.* — 2016. — Vol. 58, no. 1. — P. 014012.
328. Анализ малых примесей тяжелых элементов в солнечной плазме с помощью уравнения состояния SAHA-S / Аюков С. В., Батурин В. А., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Старостин А. Н. и Фортвов В. Е. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2004. — Т. 80, № 3. — С. 163–166.
329. Бушман А. В., Фортвов В. Е. Модели уравнения состояния вещества // *УФН.* — 1983. — Т. 140, № 6. — С. 177–232.

330. Фортов В. Е. Уравнения состояния вещества. От идеального газа до кварк-глюонной плазмы. — М. : Физматлит, 2012. — 492 с.
331. Ломоносов И. В., Фортова С. В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. — 2017. — Т. 55, № 4. — С. 596–626.
332. Lomonosov I. V. Multi-phase equation of state for aluminum // Laser Part. Beams. — 2007. — Vol. 25, no. 4. — P. 567–584.
333. Метастабильные состояния жидкого металла при электрическом взрыве / Ткаченко С. И., Хищенко К. В., Воробьев В. С., Левашов П. Р., Ломоносов И. В. и Фортов В. Е. // ТВТ. — 2001. — Т. 39, № 5. — С. 728–742.
334. The thermal instabilities on electrical explosion of metal wires / Oreshkin V. I., Baksht R. V., Ratakhin N. A., Labetsky A. Y., Rousskikh A. G., et al. // AIP Conf. Proc. — 2006. — Vol. 808, no. 1. — P. 103–106.
335. Образование страт при быстром электрическом взрыве цилиндрических проводников / Орешкин В. И., Хищенко К. В., Левашов П. Р., Русских А. Г. и Чайковский С. А. // ТВТ. — 2012. — Т. 50, № 5. — С. 625–637.
336. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 т. — 6-е, испр. изд. — М. : Физматлит, 2021. — Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — 800 с.
337. Feynman R. P., Metropolis N., Teller E. Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory // Phys. Rev. — 1949. — Vol. 75. — P. 1561–1573.
338. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В. Статистическая модель вещества // УФН. — 1975. — Т. 117, № 9. — С. 3–47.
339. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model / Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., and Khishchenko K. V. // J. Phys. A. — 2010. — Vol. 43, no. 33. — P. 335003.
340. Шпатаковская Г. В. Квазиклассическая модель строения вещества // УФН. — 2012. — Т. 182, № 5. — С. 457–494.
341. Dyachkov S., Levashov P. Region of validity of the finite-temperature Thomas-Fermi model with respect to quantum and exchange corrections // Phys. Plasmas. — 2014. — Vol. 21, no. 5. — P. 052702.

342. Dyachkov S., Levashov P., Minakov D. Region of validity of the Thomas-Fermi model with corrections // *Phys. Plasmas*. — 2016. — Vol. 23, no. 11. — P. 112705.
343. 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 // *Comput. Phys. Commun.* — 2019. — Vol. 235. — P. 378–387.
344. Dyachkov S. A., Minakov D. V., Levashov P. R. The wide-range model of shell effects in hot plasma with semiclassical approximation for bound electrons // *J. Phys. Conf. Ser.* — 2020. — Vol. 1556, no. 1. — P. 012044.
345. Киржниц Д. А. Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми // *ЖЭТФ*. — 1957. — Т. 32. — С. 115–123.
346. Computational many-particle physics / ed. by Fehske H., Schneider R., Weiße A. — Berlin Heidelberg : Springer. — 2008. — Vol. 739 of *Lect. Notes Phys.* — 780 p.
347. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. — М. : Научный мир, 2013. — 578 с.
348. Allen M. P., Tildesley D. J. *Computer simulation of liquids* (2nd edn). — Oxford, UK : Oxford university press, 1989. — 640 p.
349. Equation of state calculations by fast computing machines / Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., and Teller E. // *J. Chem. Phys.* — 1953. — Vol. 21, no. 6. — P. 1087–1092.
350. Норман Г. Э., Филинов В. С. Исследование фазовых переходов с помощью метода Монте-Карло // *ТВТ*. — 1969. — Т. 7, № 2. — С. 233–240.
351. Wood W., Parker F. Monte Carlo Equation of State of Molecules Interacting with the Lennard-Jones Potential. I. A Supercritical Isotherm at about Twice the Critical Temperature // *J. Chem. Phys.* — 1957. — Vol. 27, no. 3. — P. 720–733.
352. Brush S. G., Sahlin H. L., Teller E. Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I // *J. Chem. Phys.* — 1966. — Vol. 45, no. 6. — P. 2102–2118.
353. Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. Парные корреляционные функции в псевдопотенциальной модели неидеальной плазмы // *ТВТ*. — 1974. — Т. 12, № 2. — С. 267–272.
354. Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте-Карло в статисти-

- ческой термодинамике. — М. : Наука, 1977. — 228 с.
355. Валуев А. А., Норман Г. Э. Метод молекулярной динамики в теории электронных коэффициентов переноса неидеальной плазмы // ТВТ. — 1977. — Т. 15, № 4. — С. 689–694.
356. Norman G. E., Valuev A. A. Electrical conductivity of nonideal plasma // Plasma Physics. — 1979. — Vol. 21, no. 6. — P. 531.
357. Hansen J. P. Statistical mechanics of dense ionized matter. I. Equilibrium properties of the classical one-component plasma // Phys. Rev. A. — 1973. — Vol. 8, no. 6. — P. 3096.
358. Pollock E. L., Hansen J.-P. Statistical mechanics of dense ionized matter. II. Equilibrium properties and melting transition of the crystallized one-component plasma // Phys. Rev. A. — 1973. — Vol. 8, no. 6. — P. 3110.
359. Hansen J.-P., McDonald I. R., Pollock E. L. Statistical mechanics of dense ionized matter. III. Dynamical properties of the classical one-component plasma // Phys. Rev. A. — 1975. — Vol. 11, no. 3. — P. 1025.
360. DeWitt H. E. Asymptotic form of the classical one-component plasma fluid equation of state // Phys. Rev. A. — 1976. — Vol. 14, no. 3. — P. 1290.
361. Hansen J. P., McDonald I. R. Microscopic simulation of a hydrogen plasma // Phys. Rev. Lett. — 1978. — Vol. 41, no. 20. — P. 1379.
362. Hansen J. P., McDonald I. R. Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma // Phys. Rev. A. — 1981. — Vol. 23. — P. 2041–2059.
363. Hansen J. P., McDonald I. R. Thermal relaxation in a strongly coupled two-temperature plasma // Phys. Lett. A. — 1983. — Vol. 97, no. 1-2. — P. 42–44.
364. Slattery W. L., Doolen G. D., DeWitt H. E. Improved equation of state for the classical one-component plasma // Phys. Rev. A. — 1980. — Vol. 21, no. 6. — P. 2087.
365. Slattery W. L., Doolen G. D., DeWitt H. E. N dependence in the classical one-component plasma Monte Carlo calculations // Phys. Rev. A. — 1982. — Vol. 26, no. 4. — P. 2255.
366. Stringfellow G. S., DeWitt H. E., Slattery W. L. Equation of state of the one-component plasma derived from precision Monte Carlo calculations // Phys. Rev. A. — 1990. — Vol. 41, no. 2. — P. 1105.

367. Barker A. A. Monte carlo calculations of the radial distribution functions for a proton-electron plasma // *Aust. J. Phys.* — 1965. — Vol. 18, no. 2. — P. 119–134.
368. Barker A. A. Monte Carlo Study of a Hydrogenous Plasma near the Ionization Temperature // *Phys. Rev.* — 1968. — Vol. 171, no. 1. — P. 186.
369. Норман Г. Э., Филинов В. С., Воробьев В. С. К статистической теории плотной плазмы // *ЖЭТФ.* — 1969. — Т. 57. — С. 838–849.
370. Валуев А. А., Норман Г. Э., Филинов В. С. Псевдопотенциальная модель неидеальной многократно ионизованной плазмы и ее исследование методом Монте-Карло // *ТВТ.* — 1974. — Т. 12, № 5. — С. 931–939.
371. Alder B. J., Wainwright T. E. Phase transition for a hard sphere system // *The Journal of chemical physics.* — 1957. — Vol. 27, no. 5. — P. 1208–1209.
372. Verlet L. Computer" experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Physical review.* — 1967. — Vol. 159, no. 1. — P. 98.
373. Dynamical properties and plasmon dispersion of a weakly degenerate correlated one-component plasma / Golubnychiy V., Bonitz M., Kremp D., and Schlanges M. // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 64, no. 1. — P. 016409.
374. Donkó Z., Nyíri B. Molecular dynamics calculation of the thermal conductivity and shear viscosity of the classical one-component plasma // *Phys. Plasmas.* — 2000. — Vol. 7, no. 1. — P. 45–50.
375. Mithen J. P., Daligault J., Gregori G. Molecular Dynamics Simulations for the Shear Viscosity of the One-Component Plasma // *Contrib. Plasma Phys.* — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 58–61.
376. Scheiner B., Baalrud S. D. Testing thermal conductivity models with equilibrium molecular dynamics simulations of the one-component plasma // *Phys. Rev. E.* — 2019. — Vol. 100, no. 4. — P. 043206.
377. Zwicknagel G. Molecular dynamics simulations of the dynamics of correlations and relaxation in an OCP // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — Vol. 39, no. 1-2. — P. 155–158.
378. Molecular dynamic simulations of strongly coupled plasmas / Zwicknagel G., Klakow D., Reinhard P.-G., and Toepffer C. // *Contrib. Plasma Phys.* — 1993. — Vol. 33, no. 5-6. — P. 395–398.

379. Pschiwul T., Zwicknagel G. Numerical simulation of the dynamic structure factor of a two-component model plasma // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36. — P. 6251–6258.
380. Murillo M. S., Dharma-Wardana M. W. C. Temperature relaxation in hot dense hydrogen // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100, no. 20. — P. 205005.
381. Molecular dynamics simulations of temperature equilibration in dense hydrogen / Glosli J. N., Graziani F. R., More R. M., Murillo M. S., Streitz F. H., et al. // *Phys. Rev. E.* — 2008. — Vol. 78, no. 2. — P. 025401.
382. Large-scale molecular dynamics simulations of dense plasmas: The Cimarron Project / Graziani F. R., Batista V. S., Benedict L. X., Castor J. I., Chen H., et al. // *High Energy Density Phys.* — 2012. — Vol. 8, no. 1. — P. 105–131.
383. Валуев А. А. О колебаниях электронов в неидеальной плазме // *ТВТ.* — 1977. — Т. 15, № 6. — С. 1143–1147.
384. Валуев А. А., Норман Г. Э., Подлипчук В. Ю. Метод молекулярной динамики: теория и приложения // В сб. “Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества” / под ред. под ред. Самарского А.А К. Н. — М. : Наука, 1989. — С. 5–40.
385. Валуев А. А., Морозов И. В., Норман Г. Э. Ленгмюровские волны и ионный звук в неидеальной плазме. Молекулярно-динамический расчет // *ДАН.* — 1998. — Т. 362, № 6.
386. Morozov I. V., Norman G. E., Valuev A. A. K-Entropies of Electrons and Ions in Nonideal Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — Vol. 39, no. 4. — P. 307–310.
387. Morozov I. V., Norman G. E., Valuev A. A. K-entropy (average Lyapunov exponent), dynamics and chaos for particle trajectories. Molecular dynamics simulation for electron-ion strongly coupled plasmas // *J. Phys. IV France.* — 2000. — Vol. 10, no. PR5. — P. 251–254.
388. Morozov I. V., Norman G. E., Valuev A. A. Stochastic properties of strongly coupled plasmas // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 63, no. 3. — P. 036405.
389. Morozov I. V., Norman G. E. Non-exponential dynamic relaxation in strongly nonequilibrium nonideal plasmas // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 6005.

390. Nonideal plasmas as non-equilibrium media / Morozov I. V., Norman G. E., Valuev A. A., and Valuev I. A. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 32. — P. 8723.
391. Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Метастабильная переохлажденная плазма // *УФН.* — 1994. — Т. 164, № 3. — С. 297–307.
392. Quasiclassical Theory and Molecular Dynamics of Two-Component Nonideal Plasmas / Ebeling W., Norman G. E., Valuev A. A., and Valuev I. A. // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — Vol. 39, no. 1-2. — P. 61–64.
393. 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.
394. Pfalzner S., Gibbon P. Direct calculation of inverse-bremsstrahlung absorption in strongly coupled, nonlinearly driven laser plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 57, no. 4. — P. 4698.
395. Александров А. Ф., Богданкевич Л. С., Рухадзе А. А. Колебания и волны в плазменных средах. — М. : Изд-во МГУ, 1990. — 271 с.
396. Валуев А. А., Каклюгин А. С., Норман Г. Э. Плазменные волны в неидеальной плазме // *ЖЭТФ.* — 1998. — Т. 113, № 3. — С. 880–896.
397. Adamjan S. V., Meyer T., Tkachenko I. M. OCP Dynamical Structure Factor and the Plasma Dispersion: Method of Moments // *Contrib. Plasma Phys.* — 1989. — Vol. 29, no. 4-5. — P. 373–375.
398. Rylyuk V. M., Tkachenko I. M. Dielectric tensor of strongly coupled plasmas // *Phys. Rev. A.* — 1991. — Vol. 44, no. 2. — P. 1287.
399. Dynamic properties of one-component strongly coupled plasmas: The sum-rule approach / Arkhipov Y. V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A. E., Tkachenko I. M., and Zwicknagel G. // *Phys. Rev. E.* — 2010. — Vol. 81, no. 2. — P. 026402.
400. Direct determination of dynamic properties of Coulomb and Yukawa classical one-component plasmas / Arkhipov Y. V., Askaruly A., Davletov A. E., Dubovtsev D. Y., Donkó Z., Hartmann P., Korolov I., Conde L., and Tkachenko I. M. // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Vol. 119, no. 4. — P. 045001.
401. Dynamic characteristics of three-dimensional strongly coupled plasmas / Arkhipov Y. V., Ashikbayeva A., Askaruly A., Davletov A. E., Dubovtsev D. Y.,

- Santybayev K. S., Syzganbayeva S. A., Conde L., and Tkachenko I. M. // *Phys. Rev. E.* — 2020. — Vol. 102, no. 5. — P. 053215.
402. Dimonte G., Daligault J. Molecular-dynamics simulations of electron-ion temperature relaxation in a classical Coulomb plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, no. 13. — P. 135001.
403. Two-temperature relaxation in nonideal partially ionized plasmas / Ohde T., Bonitz M., Bornath T., Kremp D., and Schlanges M. // *Phys. Plasmas.* — 1996. — Vol. 3, no. 4. — P. 1241–1249.
404. Dharma-Wardana M. W. C., Perrot F. Energy relaxation and the quasiequation of state of a dense two-temperature nonequilibrium plasma // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 58, no. 3. — P. 3705.
405. Temperature relaxation in two-temperature states of dense electron-ion systems / Hazak G., Zinamon Z., Rosenfeld Y., and Dharma-Wardana M. W. C. // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 64, no. 6. — P. 066411.
406. Gericke D. O., Murillo M. S., Schlanges M. Dense plasma temperature equilibration in the binary collision approximation // *Phys. Rev. E.* — 2002. — Vol. 65, no. 3. — P. 036418.
407. Relaxation of composition and species temperatures in laser-and shock-produced plasmas / Gericke D. O., Grubert G. K., Bornath T., and Schlanges M. // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4727.
408. Last I., Jortner J. Quasiresonance ionization of large multicharged clusters in a strong laser field // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 60, no. 3. — P. 2215.
409. Spatially resolved collective excitations of nano-plasmas via molecular dynamics simulations and fluid dynamics / Raitza T., Reinholz H., Reinhard P. G., Röpke G., and Broda I. // *New J. Phys.* — 2012. — Vol. 14, no. 11. — P. 115016.
410. 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.
411. Saalman U., Rost J.-M. Ionization of clusters in intense laser pulses through collective electron dynamics // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 22. — P. 223401.
412. Intense VUV laser cluster interaction in the strong coupling regime / Jungreuth-

- mayer C., Ramunno L., Zanghellini J., and Brabec T. // *Phys. Lett. B.* — 2005. — Vol. 38, no. 16. — P. 3029.
413. 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.
414. Heidenreich A., Last I., Jortner J. Extreme ionization of Xe clusters driven by ultraintense laser fields // *J. Chem. Phys.* — 2007. — Vol. 127, no. 7. — P. 074305.
415. Last I., Jortner J. Dynamics of the Coulomb explosion of large clusters in a strong laser field // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 62, no. 1. — P. 013201.
416. Last I., Jortner J. Scaling procedure for simulations of extreme ionizations and Coulomb explosion of large clusters // *Phys. Rev. A.* — 2007. — Vol. 75, no. 4. — P. 042507.
417. Coulomb explosion of simple metal clusters in intense laser fields / Belkacem M., Megi F., Reinhard P.-G., Suraud E., and Zwicknagel G. // *Phys. Rev. A.* — 2006. — Vol. 73, no. 5. — P. 051201.
418. Peltz C., Fennel T. Resonant charging of Xe clusters in helium nanodroplets under intense laser fields // *Eur. Phys. J. D.* — 2011. — Vol. 63, no. 2. — P. 281–288.
419. Winkel M., Gibbon P. Spatially Resolved Electronic Correlations in Nanoclusters // *Contrib. Plasma Phys.* — 2013. — Vol. 53, no. 4-5. — P. 254–262.
420. Last I., Jortner J., Heidenreich A. Two-directional collisional energy exchange between electrons and ions in exploding clusters // *Eur. Phys. J.: Spec. Top.* — 2021. — Vol. 230, no. 23. — P. 4045–4055.
421. Ditmire T. Simulation of exploding clusters ionized by high-intensity femtosecond laser pulses // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 57, no. 6. — P. R4094.
422. Jurek Z., Ziaja B., Santra R. Applicability of the classical molecular dynamics method to study x-ray irradiated molecular systems // *J. Phys. B.* — 2014. — Vol. 47, no. 12. — P. 124036.
423. Heidenreich A., Last I., Jortner J. Extreme dynamics and energetics of Coulomb explosion of Xe clusters // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2009. — Vol. 11, no. 1. — P. 111–124.
424. Control of ionization in the interaction of strong laser fields with dense nanoplasmas / Hilse P., Bornath T., Moll M., Schlanges M., Truong N. X., Göde S., Tigges-

- bäumker J., and Meiwes-Broer K.-H. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2012. — Vol. 52, no. 1. — P. 28–32.
425. Ланкин А. В., Норман Г. Э. Парные флуктуации в неидеальной плазме и их ограничение у порога ионизации // *ТВТ.* — 2008. — Т. 46, № 2. — С. 170–184.
426. Ланкин А. В., Норман Г. Э. Флуктуационный подход к описанию неидеальной плазмы. Часть I. Равновесная плазма // *Прикладная физика.* — 2009. — № 3. — С. 25–32.
427. Ланкин А. В., Норман Г. Э. Флуктуационный подход к описанию неидеальной плазмы. Часть II. Столкновительная рекомбинация в неравновесной плазме // *Прикладная физика.* — 2009. — № 3. — С. 33–40.
428. Robicheaux F., Hanson J. D. Simulation of the expansion of an ultracold neutral plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, no. 5. — P. 055002.
429. Pohl T., Pattard T., Rost J. M. Coulomb crystallization in expanding laser-cooled neutral plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92, no. 15. — P. 155003.
430. Daligault J. Diffusion in ionic mixtures across coupling regimes // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 108, no. 22. — P. 225004.
431. Daligault J. Practical model for the self-diffusion coefficient in Yukawa one-component plasmas // *Phys. Rev. E.* — 2012. — Vol. 86, no. 4. — P. 047401.
432. Mazevet S., Collins L. A., e J. D. Evolution of ultracold neutral plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, no. 5. — P. 055001.
433. Kuzmin S. G., O’Neil T. M. Numerical simulation of ultracold plasmas: How rapid intrinsic heating limits the development of correlation // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, no. 6. — P. 065003.
434. Kuzmin S. G., O’Neil T. M. Numerical simulation of ultracold plasmas // *Phys. Plasmas.* — 2002. — Vol. 9, no. 9. — P. 3743–3751.
435. Коэффициент столкновительной рекомбинации в ультрахолодной плазме. Расчет методом молекулярной динамики / Бобров А. А., Бронин С. Я., Зеленер Б. Б., Зеленер Б. В., Манькин Э. А. и Хихлуха Д. Р. // *ЖЭТФ.* — 2011. — Т. 139, № 3. — С. 605–612.
436. Bobrov A. A., Vorob’Ev V. S., Zelener B. V. Transfer coefficients in ultracold strongly coupled plasma // *Phys. Plasmas.* — 2018. — Vol. 25, no. 3. — P. 033513.
437. Electrical current and conductivity in ultracold plasma: Study by molecular dy-

- namics method / Bobrov A. A., Bronin S. Y., Zelener B. B., and Zelener B. V. // J. Phys. Conf. Ser. — 2019. — Vol. 1147, no. 1. — P. 012098.
438. 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.
439. Molecular dynamics calculation of thermal conductivity and shear viscosity in two-component fully ionized strongly coupled plasma / Bobrov A. A., Bronin S. Y., Klyarfeld A. B., Zelener B. B., and Zelener B. V. // Phys. Plasmas. — 2020. — Vol. 27, no. 1. — P. 010701.
440. Distribution function of the ion microscopic field in strongly coupled ultracold plasma: Molecular dynamics simulations / Bobrov A. A., Bronin S. Y., Klyarfeld A. B., Korchagin D. S., Zelener B. B., and Zelener B. V. // J. Phys. Conf. Ser. — 2021. — Vol. 1787, no. 1. — P. 012045.
441. Aarseth S. J. Gravitational N-body simulations: tools and algorithms. — Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2003. — 430 p.
442. Murillo M. S. Ultrafast dynamics of strongly coupled plasmas // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 96, no. 16. — P. 165001.
443. Bronin S. Y., Zelener B. B., Zelener B. V. Refraction, absorption and reflectivity of radiation in strongly coupled plasma // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. — 2021. — Vol. 268. — P. 107621.
444. Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Термодинамические параметры и распределения мгновенных значений микрополей в неидеальной плазме // ДАН. — 1988. — Т. 299, № 1. — С. 106–109.
445. Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Неожиданные свойства классической кулоновской плазмы, обнаруженные на основе моделирования из первых принципов // Математическое моделирование. — 1992. — Т. 4, № 7. — С. 3–30.
446. Майоров С. А. Об эволюции ультрахолодной плазмы // Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева РАН. — 2014. — Т. 41, № 3. — С. 46–56.
447. Майоров С. А. О вычислении флуктуации температуры и давления в куло-

- новской системе // ТВТ. — 2014. — Т. 52, № 4. — С. 640–642.
448. Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm // Nature. — 1986. — Vol. 324, no. 6096. — P. 446–449.
449. A massively parallel, multi-disciplinary Barnes-Hut tree code for extreme-scale N -body simulations / Winkel M., Speck R., Hübner H., Arnold L., Krause R., and Gibbon P. // Comput. Phys. Commun. — 2012. — Vol. 183, no. 4. — P. 880–889.
450. Хокни Р., Иствуд Д. Численное моделирование методом частиц. — М. : Мир, 1987. — 640 с.
451. Ultrafast electron kinetics in short pulse laser-driven dense hydrogen / Zastra U., Sperling P., Fortmann-Grote C., Becker A., Bornath T., Bredow R., Döppner T., Fennel T., Fletcher L. B., Förster E., et al. // Phys. Lett. B. — 2015. — Vol. 48, no. 22. — P. 224004.
452. Attosecond Plasma Wave Dynamics in Laser-Driven Cluster Nanoplasmas / Varin C., Peltz C., Brabec T., and Fennel T. // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Vol. 108, no. 17. — P. 175007.
453. Fully microscopic analysis of laser-driven finite plasmas using the example of clusters / Peltz C., Varin C., Brabec T., and Fennel T. // New J. Phys. — 2012. — Vol. 14, no. 6. — P. 065011.
454. Light wave driven electron dynamics in clusters / Varin C., Peltz C., Brabec T., and Fennel T. // Ann. Phys. — 2014. — Vol. 526, no. 3-4. — P. 135–156.
455. Becke A. D. Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics // J. Chem. Phys. — 2014. — Vol. 140, no. 18. — P. 18A301.
456. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136, no. 3B. — P. B864.
457. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. — 1965. — Vol. 140, no. 4A. — P. A1133.
458. Perdew J. P., Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy // Phys. Rev. B. — 1992. — Vol. 45, no. 23. — P. 13244.
459. von Barth U., Hedin L. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i // J. Phys. C. — 1972. — Vol. 5, no. 13. — P. 1629.
460. Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approxi-

- mations for many-electron systems // *Phys. Rev. B.* — 1981. — Vol. 23, no. 10. — P. 5048.
461. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 77, no. 18. — P. 3865.
462. Verma P., Truhlar D. G. Status and challenges of density functional theory // *Trends in Chemistry.* — 2020. — Vol. 2, no. 4. — P. 302–318.
463. Density functional theory is straying from the path toward the exact functional / Medvedev M. G., Bushmarinov I. S., Sun J., Perdew J. P., and Lyssenko K. A. // *Science.* — 2017. — Vol. 355, no. 6320. — P. 49–52.
464. Bylaska E. J. Plane-wave DFT methods for chemistry // *Annu. Rep. Comput. Chem.* — 2017. — Vol. 13. — P. 185–228.
465. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // *Computational materials science.* — 1996. — Vol. 6, no. 1. — P. 15–50.
466. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54, no. 16. — P. 11169.
467. Tuckerman M. E. Ab initio molecular dynamics: basic concepts, current trends and novel applications // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2002. — Vol. 14, no. 50. — P. R1297.
468. Car R., Parrinello M. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory // *Phys. Rev. Lett.* — 1985. — Vol. 55, no. 22. — P. 2471.
469. Ab initio molecular dynamics with excited electrons / Alavi A., Kohanoff J., Parrinello M., and Frenkel D. // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 73, no. 19. — P. 2599.
470. Dharmawardana M. W. C. A Review of Studies on Strongly-Coupled Coulomb Systems Since the Rise of DFT and SCCS-1977 // *Contrib. Plasma Phys.* — 2015. — Vol. 55, no. 2-3. — P. 85–101.
471. Molecular dynamics simulations of compressed hydrogen / Collins L. A., Kress J. D., Bickham S. R., Lenosky T. J., and Troullier N. J. // *High Pressure Res.* — 2000. — Vol. 16, no. 5-6. — P. 313–329.
472. Holst B., Redmer R., Desjarlais M. P. Thermophysical properties of warm dense

- hydrogen using quantum molecular dynamics simulations // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77, no. 18. — P. 184201.
473. Norman G. E., Saitov I. M., Sartan R. A. Metastable molecular fluid hydrogen at high pressures // *Contrib. Plasma Phys.* — 2019. — Vol. 59, no. 6. — P. e201800173.
474. 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.
475. 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.
476. Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of semiconductors and metals / Recoules V., Clérouin J., Zérah G., Anglade P. M., and Mazevet S. // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96, no. 5. — P. 055503.
477. Stegailov V. V. Stability of LiF crystal in the warm dense matter state // *Contrib. Plasma Phys.* — 2010. — Vol. 50, no. 1. — P. 31–34.
478. Thermodynamic functions of the heated electron subsystem in the field of cold nuclei / Sin'ko G. V., Smirnov N. A., Ovechkin A. A., Levashov P. R., and Khishchenko K. V. // *High Energy Density Phys.* — 2013. — Vol. 9, no. 2. — P. 309–314.
479. 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, no. 7. — P. 073302.
480. 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.
481. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state / Levashov P. R., Sin'ko G. V., Smirnov N. A., Minakov D. V., Shemyakin O. P., and Khishchenko K. V. // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.
482. Lambert F., Clérouin J., Zérah G. Very-high-temperature molecular dynamics //

- Phys. Rev. E. — 2006. — Vol. 73, no. 1. — P. 016403.
483. Sjoström T., Daligault J. Fast and accurate quantum molecular dynamics of dense plasmas across temperature regimes // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Vol. 113, no. 15. — P. 155006.
484. Evidence for out-of-equilibrium states in warm dense matter probed by x-ray Thomson scattering / Clérouin J., Robert G., Arnault P., Ticknor C., Kress J. D., and Collins L. A. // Phys. Rev. E. — 2015. — Vol. 91, no. 1. — P. 011101.
485. Starrett C. E. Thomas-Fermi simulations of dense plasmas without pseudopotentials // Phys. Rev. E. — 2017. — Vol. 96, no. 1. — P. 013206.
486. Povarnitsyn M. E., Knyazev D. V., Levashov P. R. Ab initio simulation of complex dielectric function for dense aluminum plasma // Contrib. Plasma Phys. — 2012. — Vol. 52, no. 2. — P. 145–148.
487. Warm dense matter demonstrating non-drude conductivity from observations of nonlinear plasmon damping / Witte B. B. L., Fletcher L. B., Galtier E., Gamboa E., Lee H. J., et al. // Phys. Rev. Lett. — 2017. — Vol. 118, no. 22. — P. 225001.
488. Virial expansion of the electrical conductivity of hydrogen plasmas / Röpke G., Schörner M., Redmer R., and Bethkenhagen M. // Phys. Rev. E. — 2021. — Vol. 104, no. 4. — P. 045204.
489. Runge E., Gross E. K. U. Density-functional theory for time-dependent systems // Phys. Rev. Lett. — 1984. — Vol. 52, no. 12. — P. 997.
490. Curchod B. F. E., Martínez T. J. Ab initio nonadiabatic quantum molecular dynamics // Chemical reviews. — 2018. — Vol. 118, no. 7. — P. 3305–3336.
491. Bauer D., Macchi A. Dynamical ionization ignition of clusters in intense short laser pulses // Phys. Rev. A. — 2003. — Vol. 68, no. 3. — P. 033201.
492. Legrand C., Suraud E., Reinhard P. G. Semi-classical description of small Na clusters structure and dynamics // Phys. Lett. B. — 2006. — Vol. 39, no. 11. — P. 2481.
493. Magyar R. J., Shulenburger L., Baczewski A. D. Stopping of Deuterium in Warm Dense Deuterium from Ehrenfest Time-Dependent Density Functional Theory // Contrib. Plasma Phys. — 2016. — Vol. 56, no. 5. — P. 459–466.
494. Замалин В. М., Норман Г. Э. Метод Монте-Карло в фейнмановской формулировке квантовой статистики // Журнал вычислительной математики и

- математической физики. — 1973. — Т. 13, № 2. — С. 408–420.
495. Pollock E. L., Ceperley D. M. Simulation of quantum many-body systems by path-integral methods // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 30, no. 5. — P. 2555.
496. Ceperley D. M. Path integrals in the theory of condensed helium // *Rev. Mod. Phys.* — 1995. — Vol. 67, no. 2. — P. 279.
497. Thermodynamics of Hydrogen and Hydrogen-Helium Plasmas: Path Integral Monte Carlo Calculations and Chemical Picture / Filinov V. S., Levashov P. R., Bonitz M., and Fortov V. E. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2005. — Vol. 45, no. 3-4. — P. 258–265.
498. Фейнман Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — Рипол Классик, 2013.
499. Филинов В. С. Применение метода Монте-Карло к исследованию неидеальных слабо вырожденных ферми-систем // *ТВТ.* — 1975. — Т. 13, № 6. — С. 1146–1152.
500. Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems / Loh Jr E. Y., Gubernatis J. E., Scalettar R. T., White S. R., Scalapino D. J., and Sugar R. L. // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 41, no. 13. — P. 9301.
501. Troyer M., Wiese U.-J. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 17. — P. 170201.
502. Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas / Filinov V. S., Bonitz M., Levashov P., Fortov V. E., Ebeling W., Schlanges M., and Koch S. W. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36, no. 22. — P. 6069.
503. Расчет ударной адиабаты дейтерия квантовым методом Монте-Карло при давлении выше 1 Мбар / Филинов В. С., Левашов П. Р., Бониц М. и Фортвов В. Е. // *Физика плазмы.* — 2005. — Т. 31, № 8. — С. 760–764.
504. Ceperley D. M. Fermion nodes // *J. Stat. Phys.* — 1991. — Vol. 63, no. 5. — P. 1237–1267.
505. Militzer B., Pollock E. L. Variational density matrix method for warm, condensed matter: Application to dense hydrogen // *Phys. Rev. E.* — 2000. — Vol. 61, no. 4. — P. 3470.
506. Militzer B., Ceperley D. M. Path integral Monte Carlo calculation of the deuterium

- Hugoniot // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85, no. 9. — P. 1890.
507. Militzer B., Driver K. P. Development of path integral Monte Carlo simulations with localized nodal surfaces for second-row elements // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 115, no. 17. — P. 176403.
508. First-principles equation of state database for warm dense matter computation / Militzer B., González-Cataldo F., Zhang S., Driver K. P., and Soubiran F. // *Phys. Rev. E.* — 2021. — Vol. 103, no. 1. — P. 013203.
509. Marx D., Parrinello M. Ab initio path integral molecular dynamics: Basic ideas // *J. Chem. Phys.* — 1996. — Vol. 104, no. 11. — P. 4077–4082.
510. Klakow D., Toepffer C., Reinhard P.-G. Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems // *J. Chem. Phys.* — 1994. — Vol. 101. — P. 10766–10774.
511. Heller E. J. Time-dependent approach to semiclassical dynamics // *J. Chem. Phys.* — 1975. — Vol. 62, no. 4. — P. 1544–1555.
512. Semiclassical theory of quantum propagation: The Coulomb potential / Barnes I. M. S., Nauenberg M., Nockleby M., and Tomsovic S. // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71, no. 13. — P. 1961.
513. Klakow D., Toepffer C., Reinhard P.-G. Hydrogen under extreme conditions // *Phys. Lett. A.* — 1994. — Vol. 192, no. 1. — P. 55–59.
514. Ebeling W., Förster A., Podlipchuk V. Y. Quantum wave-packets simulation of ionization processes in dense plasmas // *Phys. Lett. A.* — 1996. — Vol. 218, no. 3-6. — P. 297–303.
515. Ebeling W., Militzer B. Quantum molecular dynamics of partially ionized plasmas // *Phys. Lett. A.* — 1997. — Vol. 226, no. 5. — P. 298–304.
516. Knaup M., Reinhard P.-G., Toepffer C. Wave packet molecular dynamics simulations of hydrogen near the transition to a metallic fluid // *Contrib. Plasma Phys.* — 1999. — Vol. 39, no. 1-2. — P. 57–60.
517. Wave packet molecular dynamics simulations of warm dense hydrogen / Knaup M., Reinhard P.-G., Toepffer C., and Zwicknagel G. // *J. Phys. A.* — 2003. — Vol. 36. — P. 6165–6171.
518. Zwicknagel G., Pschiwul T. WPMD simulations of a two-component plasma // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39. — P. 4359–4364.

519. Lenglet A., Maynard G., Kurilenkov Y. K. N-electron dynamics of a heavy atom in strong fields // *J. Phys. A.* — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4671.
520. Lenglet A., Maynard G. Wave Packet Molecular Dynamics to study atom electrons in strong fields // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A.* — 2007. — Vol. 577. — P. 343–348.
521. Feldmeier H., Schnack J. Molecular dynamics for fermions // *Rev. Mod. Phys.* — 2000. — Vol. 72, no. 3. — P. 655–688.
522. Wave packet simulation of dense hydrogen / Jakob B., Reinhard P.-G., Toepffer C., and Zwicknagel G. // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 76. — P. 036406.
523. 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.
524. The properties of hydrogen and helium under extreme conditions / McMahon J. M., Morales M. A., Pierleoni C., and Ceperley D. M. // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Vol. 84, no. 4. — P. 1607.
525. Su J. T., Goddard III W. A. Excited Electron Dynamics Modeling of Warm Dense Matter // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 185003.
526. Large-scale, long-term nonadiabatic electron molecular dynamics for describing material properties and phenomena in extreme environments / Jaramillo-Botero A., Su J., Qi A., and Goddard III W. A. // *J. Comput. Chem.* — 2011. — Vol. 32, no. 3. — P. 497–512.
527. Plimpton S. J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comput. Phys.* — 1995. — Vol. 117. — P. 1–19.
528. 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.
529. Ion drag force in complex plasmas / Khrapak S. A., Ivlev A. V., Morfill G. E., and Thomas H. M. // *Phys. Rev. E.* — 2002. — Vol. 66, no. 4. — P. 046414.
530. Standard of molecular dynamics modelling and simulation of relaxation / Kuksin A. Y., Morozov I. V., Norman G. E., Stegailov V. V., and Valuev I. A. // *Mol. Simul.* — 2005. — Vol. 31. — P. 1005–1017.
531. Сеченов В. А., Сон Э. Е., Щекотов О. Е. Электропроводность цезиевой плаз-

- мы // ТВТ. — 1977. — Т. 15, № 2. — С. 411–415.
532. Бакеев А. А., Ровинский Р. Е. Электрические свойства плазм импульсных разрядов высокого давления в инертных газах // ТВТ. — 1970. — Т. 8, № 6. — С. 1121–1127.
533. Батенин В. М., Минаев П. В. Об особенностях поведения электропроводности и излучения плотной низкотемпературной плазмы // ТВТ. — 1971. — Т. 9, № 4. — С. 676–682.
534. Андреев С. И., Гаврилова Т. В. Измерение электропроводности плазмы воздуха при давлении свыше 100 ат // ТВТ. — 1975. — Т. 13, № 1. — С. 176–178.
535. Frequency-dependent reflectivity of shock-compressed xenon plasmas / Reinholz H., Zaporoghets Y., Mintsev V., Fortov V., Morozov I., and Röpke G. // *Phys. Rev. E*. — 2003. — Vol. 68, no. 3. — P. 036403.
536. The influence of dynamical screening on the transport properties of dense plasmas / Karakhtanov V. S., Redmer R., Reinholz H., and Röpke G. // *Contrib. Plasma Phys.* — 2013. — Vol. 53, no. 9. — P. 639–652.
537. Khrapak S. A., Trigger S. A. To the optical properties of moderately non-ideal plasma // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* — 2022. — Vol. 290. — P. 108297.
538. Лавриненко Я. Исследование неидеальной электрон–ионной плазмы методом динамики волновых пакетов : Дисс. . . . канд. физ.-мат. наук : 1.3.9 : защищена 15.12.2021 г. ; ОИВТ РАН. — М., 2021. — 127 с.
539. Ruppin R. Plasmon frequencies of cube shaped metal clusters // *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters.* — 1996. — Vol. 36, no. 1. — P. 69–71.
540. Modeling arcs / Insepov Z., Norem J., Vetizer S., and Mahalingam S. // *AIP Conf. Proc.* — 2011. — Vol. 1406, no. 1. — P. 523–530.
541. Митерев А. М. Теоретические представления о формировании и эволюции треков заряженных частиц // *УФН.* — 2002. — Т. 172, № 10. — С. 1131–1164.
542. Oncological hadrontherapy with laser ion accelerators / Bulanov S. V., Esirkepov T. Z., Khoroshkov V. S., Kuznetsov A. V., and Pegoraro F. // *Phys. Lett. A.* — 2002. — Vol. 299, no. 2-3. — P. 240–247.
543. Faenov A. Y., Pikuz S. A., Shlyaptseva A. S. Precise measurements and theoretical calculations of He-like ion resonance line satellites radiated from Be-, B-, C-, N-,

- O-, and F-like ions // *Physica Scripta*. — 1994. — Vol. 49, no. 1. — P. 41.
544. Daligault J., Guet C. Kinetic and Coulombic effects in the explosion dynamics of metal clusters in intense femtosecond laser fields // *Phys. Rev. A*. — 2001. — Vol. 64, no. 4. — P. 043203.
545. Fennel T., Bertsch G. F., Meiwes-Broer K.-H. Ionization dynamics of simple metal clusters in intense fields by the Thomas-Fermi-Vlasov method // *Eur. Phys. J. D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*. — 2004. — Vol. 29, no. 3. — P. 367–378.
546. Lee M.-S., Kanhere D. G. Effects of geometric and electronic structure on the finite temperature behavior of Na 58, Na 57, and Na 55 cluster // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 75, no. 12. — P. 125427.
547. Быстрый П. Г. Динамика электронов в неидеальной кластерной наноплазме : Дисс. . . . канд. физ.-мат. наук : 01.04.08 : защищена 27.12.2017 г. ; ОИВТ РАН. — М., 2017. — 103 с.
548. 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.
549. Valuev I. Simulation of hydrogen plasma with cluster multi-range interpolation // *J. Phys. A*. — 2006. — Vol. 39, no. 17. — P. 4465.
550. 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.
551. Bandrauk A. D., Shen H. Exponential split operator methods for solving coupled time-dependent Schrödinger equations // *J. Chem. Phys.* — 1993. — Vol. 99, no. 2. — P. 1185–1193.
552. Lee H.-W., Scully M. O. A new approach to molecular collisions: Statistical quasiclassical method // *J. Chem. Phys.* — 1980. — Vol. 73, no. 5. — P. 2238–2242.
553. Angermeier W. A., White T. G. An investigation into the approximations used in wave packet molecular dynamics for the study of warm dense matter (in press) // *Plasma*. — 2021. — Vol. 4, no. 2. — P. 294–308.
554. 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., Иосилев-

- ский И. Л. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 6. — С. 452–458.
555. 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.
556. 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.
557. Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum / Minakov D. V., Levashov P. R., Khishchenko K. V., and Fortov V. E. // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.