

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ОТРАЖЕНИЯ ПЛОТНОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

Г.Н.Нигметова¹⁾, Т.С.Рамазанов²⁾, В.Н.Косов³⁾, Х.Т.Нурекенов²⁾

¹⁾ *Актауский государственный университет имени Ш.Есенова, г.Актау*

²⁾ *НИИЭТФ, Казахский национальный университет им.аль-Фараби, г.Алматы*

³⁾ *Казахский национальный педагогический университет им.Абая, г.Алматы*

На основе микроскопических функций характеризующих электродинамическое состояние плотной квазиклассической плазмы проведено исследование коэффициента отражения плазмы на основе компьютерного метода молекулярной динамики.

Введение.

В настоящей работе рассмотрена полностью ионизованная, сильно связанная водородная плазма. Плотность числа частиц $n = n_e = n_i \cong (10^{22} \div 2 \cdot 10^{26}) \text{cm}^{-3}$ и температура системы $T \cong (5 \cdot 10^4 \div 10^6) \text{K}$. Безразмерные параметры, характеризующие систему, следующие: параметр связи $\Gamma = e^2 / ak_B T$; параметр плотности $r_s = a / a_B$; параметр вырождения $\Theta = k_B T / E_F \approx 0,54 \cdot r_s / \Gamma$, где e, a, a_B, E_F - заряд, среднее расстояние между частицами, радиус Бора и энергия Ферми соответственно. При указанных параметрах системы различают сильно связанную плазму с частично-вырожденной электронной компонентой. Поэтому в данной работе $\Gamma \geq 1$; $\Theta \cong 1$; $T > 13,6$ эВ.

Использована псевдопотенциальная модель квазиклассической плазмы, согласно которой предполагается, что частицы плотной плазмы взаимодействуют между собой посредством эффективного потенциала, предложенного в [1]. Данный псевдопотенциал получен на основе классического потенциала, учитывающего корреляционные эффекты на больших расстояниях и являющегося решением граничной задачи [2,3] и эффективного потенциала [4,5], учитывающего эффекты дифракции и симметрии на малых расстояниях. Здесь $\Psi(R) = \Phi(r) / k_B T$; $R = r / a$.

В работе методом молекулярной динамики, описанным в [6], исследованы электродинамические свойства плотной квазиклассической плазмы. Число частиц в базовой ячейке бралось равным $N=2000$ и $N=5000$, из них $N/2$ электронов и $N/2$ протонов. Классические уравнения движения для частиц в системе были решены численно для значений параметра связи $\Gamma = (0,1 \div 10)$ и параметра плотности $r_s = 1; 2; 5; 10$ с помощью стандартного симметричного и антисимметричного алгоритма Верле с шагом интегрирования $\Delta t^* = 0.01 \div 0.05$ в единицах обратной ленгмюровской частоты. При решении использовались периодические граничные условия.

1. Микроскопические свойства и коэффициент отражения плотной квазиклассической плазмы.

Для исследования электродинамических (оптических) свойств плотной квазиклассической плазмы могут быть использованы динамические структурные факторы и автокорреляционные функции скоростей (АФ) для плазменных частиц (электронные) при различных начальных состояниях системы [7,8]. Полученные микроскопические характеристики системы (координаты, скорости и т.д.) усредняются по начальным

M равновесным конфигурациям ионов. К примеру, вычисление автокорреляционных функций проводится следующим образом:

$$\langle v(0)v(t) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i(A_j, t_i) \cdot \vec{v}_i(A_j, t_i + t) \quad (1)$$

В [7,8] отмечена неплохая сходимость автокорреляционных функций при различных начальных конфигурациях. Флуктуации на зависимостях автокорреляторов можно отнести в счет статистических погрешностей и они составляют $\sim 1/\sqrt{N}$. С уменьшением параметра связи, сходимость автокорреляторов ухудшается. Данный факт обусловлен уменьшением частоты столкновений частиц в слабонеидеальной плазме.

Обобщенная восприимчивость через автокорреляционную функцию скоростей выражается следующим образом [9]:

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 n_e}{3k_B T} \int_0^{\infty} \langle v(0) \cdot v(t) \rangle e^{i\omega t} dt \quad (2)$$

При наложении на однородную изотропную систему внешнего электрического поля, в рамках теории Грина-Кубо, функцией отклика системы на это возмущение будет величина $\varepsilon^{-1}(\omega)$: $E(\omega) = \varepsilon^{-1}(\omega)D(\omega)$. Здесь $D(\omega)$ - функция электрической индукции. Функция диэлектрического отклика и обобщенная восприимчивость связаны между собой следующим соотношением [9]:

$$\varepsilon(\omega) = [1 - i4\pi\alpha(\omega)/\omega]^{-1}, \quad (3)$$

где функция $\alpha(\omega)$ определяется через автокорреляционную функцию скоростей согласно (2). Заметим, что в общем случае величина $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ комплексная.

Одним из важных оптических свойств неидеальной плазмы является коэффициент отражения. Полученные в данном случае экспериментальные и теоретические данные предоставляют новую информацию для понимания механизма взаимодействия вещества, находящегося в условиях сильного межчастичного взаимодействия (плотная неидеальная плазма) с оптическим излучением умеренной интенсивности.

Знание функции диэлектрического отклика $\varepsilon(\omega)$ позволяет исследовать коэффициент отражения $R(\omega)$ неидеальной плазмы согласно следующего соотношения:

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (4)$$

На рисунке 1 приведены результаты расчета коэффициента отражения неидеальной плазмы. Для сравнения показаны экспериментальные данные, полученные из ударно-волновых экспериментов [10]. Заметим, что молекулярно-динамические расчеты удовлетворительно согласуются в диапазоне $\omega = (0,4 \div 2,5)\omega_e$ с данными экспериментальных работ, тогда как результаты теоретических оценок [11] имеют большие расхождения.

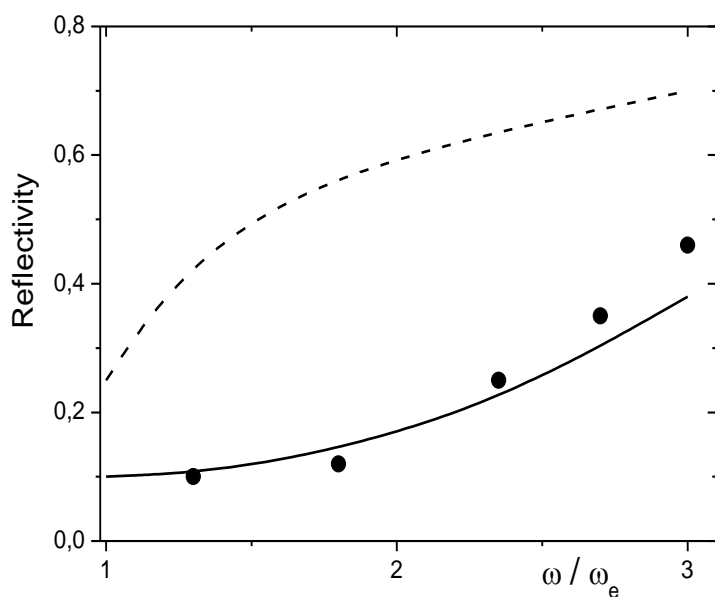


Рис.1. Коэффициент отражения неидеальной плазмы. Сплошная линия – настоящая работа; пунктир – теоретические оценки [11]; точки соответствуют эксперименту [10].
Длина волны лазера $\lambda = 1,06 \mu m$.

На рисунке 2 показаны результаты расчета коэффициента отражения неидеальной плазмы в зависимости от электронной плотности. Для сравнения показаны экспериментальные данные, полученные из ударно-волновых экспериментов [12,13].

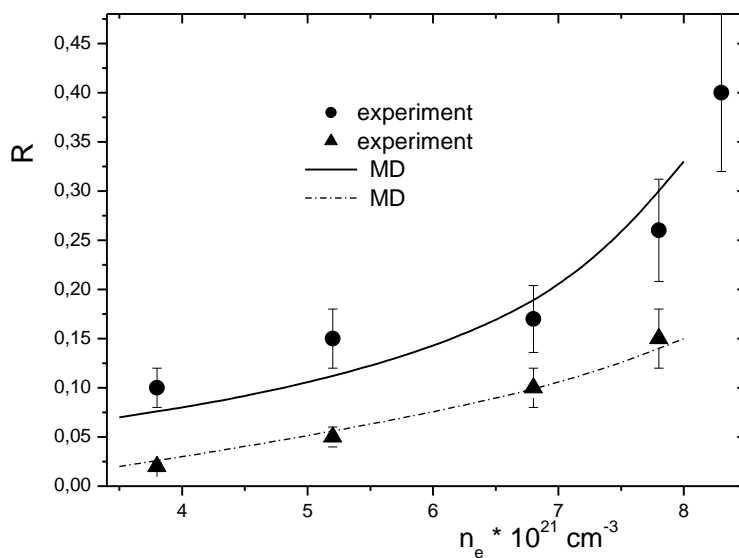


Рис. 2. Коэффициент отражения неидеальной плазмы как функция от плотности электронов системы. Кружочки и сплошная линия для длины волны лазера 694 нм; треугольники и штрих-пунктирная линия соответствуют длине волны лазера 532 нм.

Заметим, что результаты проведенного молекулярно-динамического моделирования удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. К примеру, наблюдается изменение отражательных способностей неидеальной плазмы при изменении электронной плотности системы, приводящее к высокоотражающему состоянию плазмы, характерному для металлов. Данный факт требует дальнейших подробных экспериментальных и теоретических исследований с целью выяснения механизма изменения отражательных способностей неидеальной плотной плазмы.

2. Компьютерное моделирование и правила сумм в электродинамике плазмы

Результаты компьютерного моделирования как любого эксперимента имеют статистическую погрешность, обусловленную, в основном, конечностью числа частиц в системе. Эта погрешность заранее известна и составляет порядка $\sim 1/\sqrt{N}$. При моделировании электродинамических характеристик плазмы необходимо для надежности полученных результатов дополнительно проверять выполнение некоторых точных соотношений электродинамики сплошных сред, т.н. правил сумм. К примеру, для мнимой части функции диэлектрического отклика имеем [9]:

$$\frac{m_e}{2\pi^2 e^2} \int_0^\infty \omega \varepsilon''(\omega) d\omega = n_e \quad (5)$$

Используя соотношение (3), получим следующее выражение правила сумм для обобщенной восприимчивости:

$$\int_0^\infty f(\omega) d\omega = \frac{\pi \cdot e^2 n_e}{2m_e}, \quad (6)$$

где

$$f(\omega) = \omega^2 \alpha'(\omega) / \left[(4\pi\alpha'(\omega))^2 + (\omega + 4\pi\alpha''(\omega))^2 \right]. \quad (7)$$

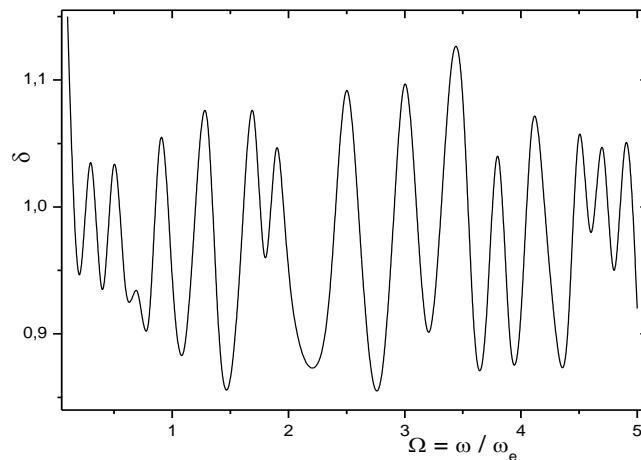


Рис. 3. Выполнимость правила сумм для мнимой части функции диэлектрического отклика при значении параметра связи $\Gamma = 5$.

Численный анализ соотношений (5) - (7) показал выполнимость правил сумм электродинамики сплошных сред применительно к условиям проведенного компьютерного моделирования с точностью до ~ 15% (см. рисунок 3).

Литература

1. F.B. Vaimbetov, M.A. Bekenov, T.S.Ramazanov. Effective potential of a semiclassical hydrogen plasma. // Phys. Lett.A. 1995, vol.197, p.157-159.
2. F.B. Vaimbetov, Kh.T. Nurekenov, T.S. Ramazanov. Electrical conductivity and scattering sections of strongly coupled hydrogen plasmas. // Physica A, 1996, vol.226, p.181-190.
3. Ф.Б. Баимбетов, Т.С. Рамазанов и др. Равновесные свойства плотной классической плазмы. Данные вычислительных экспериментов. // Теплофизика высоких температур. 1990, том 28, N3, с.595-597.
4. G. Kelbg, Effective pair potentials for hydrogen plasma. // Ann. Phys. **12** (1963) 17.
5. C. Deutsch et al., Temperature – dependent Coulomb interactions in hydrogenic systems. // Phys. Rev. A **23** (1981) 924
6. Валуев А.А., Норман Г.Э. Метод молекулярной динамики в теории электронных коэффициентов переноса неидеальной плазмы. // Теплофизика высоких температур. 1977, том 15, N 5, с.689-694.
7. T.S.Ramazanov, G.N.Nigmatova, G. Röpke, R. Redmer. Molecular dynamic simulation of the microscopic properties and electrical conductivity of a dense semiclassical plasma. // J.Plasma Phys., 2006, **72**, 1031-1035.
8. T.S.Ramazanov, G.N.Nigmatova, G. Röpke, R. Redmer. Computer simulation of microscopic and transport properties of a non-ideal plasma. // ICPIG. Netherlands. 2005. 12-110.
9. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука. 1971.
10. Минцев В.Б., Фортов В.Е., Грязнов В.К. Физика экстремальных состояний вещества. Черногловка. ОИХФ РАН. 2002. 188 с.
11. A.Esser, R.Redmer, R.Röpke. Contrib.Plasma Phys. 2003, vol.43, p.33.
12. Минцев В.Б., Фортов В.Е., Грязнов В.К. Физика экстремальных состояний вещества. Черногловка. ОИХФ РАН. 2002. 188 с.
13. T.Raitza, H.Reinholz, G.Röpke, V.Mintsev, A.Wierling. Reflectivity in shock wave fronts of xenon. // J. Phys. A. 2006. vol.39, no.17, p.4393-4399.

ТЫҒЫЗ КВАЗИКЛАССИКАЛЫҚ ПЛАЗМАНЫҢ ШАҒЫЛУ КОЭФФИЦИЕНТІН МОЛЕКУЛАЛЫҚ ДИНАМИКА ӘДІСІ НЕГІЗІНДЕГІ МОДЕЛДЕУ

Г.Н.Нығметова, Т.С.Рамазанов, В.Н.Косов, Х.Т.Нүрекен

Жүйенің электродинамикалық күйін сипаттайтын микроскопиялық функциялары негізінде тығыз квазиклассикалық плазманың молекулалық динамика әдісі арқылы шағылу коэффициенті зерттелген.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF REFLECTIVITY COEFFICIENT OF A DENSE SEMICLASSICAL PLASMA

G.N.Nigmatova, T.S.Ramazanov, V.N.Kosov, Kh.T.Nurekenov

Molecular dynamic simulation results for reflectivity coefficient of a dense semiclassical plasma are presented on the basis of the microscopic functions described of electrodynamic state of the system.