МРНТИ 29.27.31

М.К. Исанова[1], С.К. Коданова[1], Т.С. Рамазанов[1], А.К. Хикметов[1], Р.И. Голятина[2], С.А. Майоров[2,*]

[1]*НИИЭТФ, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

[2]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия*

**e-mail: mayorov_sa@mail.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПЛАЗМЫ ПОЗИТРОНИЯ

В работе методом молекулярной динамики исследованы релаксационные свойства полностью ионизованной, горячей, идеальной плазмы. В качестве примера рассмотрена классическая задача о выравнивании электронной и ионной температур при различных соотношениях масс, определены времена релаксации температур, исследованы влияние числа частиц и типа граничных условии на результаты моделирования. Проведено сравнение полученных результатов с существующими теоретическими результатами. При анализе автокорреляционных функции потока частиц одного знака в системе получены, что время распада корреляции в системе с зеркально отражающими граничными условиями имеют порядок величины обратной плазменной частоты, а для системы с периодическими граничными условиями - периода ленгмюрских колебаний. Также обнаружено, что в системе с периодическими граничными условиями время релаксации температур меньше, чем в системе с зеркально отражающими граничными условиями. Как следует из анализа результатов, влияние числа частиц на автокорреляционные функции потоков незначительно.

Ключевые слова: плазма, классическая кулоновская система, кулоновский логарифм, релаксация температур, отношение масс, метод молекулярной динамики, периодические граничные условия, зеркальные граничные условия, автокорреляционная функция тока.

Введение

В настоящее время ведутся активные исследования свойств плотной идеальной плазмы в связи с проблемой реализации инерциального термоядерного синтеза [1-6]. Отметим, что исследование процессов релаксации температур электронов и ионов актуально в целях верификации методов моделирования [7-9]. Кроме того, неизотермическая плазма появляется в экспериментах при взаимодействии потока тяжелых ионов с мишенью [10-12]. Обычно выравнивание температуры в электронной и в ионной подсистемах происходит на много быстрей чем между электронами и ионами. Последнее, как известно, связано с тем, что при столкновений передача энергии пропорциональна отношению масс частиц. Для исследования релаксационных процессов в плазме используются различные подходы [13-15] и метод молекулярной динамики (МД) является одним из наиболее популярных [16-20].

Многими авторами рассматривалась задача о релаксации температур начиная с первых кинетических моделей, в том числе с помощью вычислительного эксперимента [21-23]. Обычно теоретические модели ограничиваются случаем малого отклонения системы от равновесного состояния. Расчет релаксации энергии между двумя подсистемами, далекими от равновесия, реально возможен только на основе численного моделирования.

В настоящей работе методом молекулярной динамики проведено моделирование выравнивания температур для полностью ионизованной, горячей, идеальной плазмы. Рассмотрена плазма позитрония, т.е. система с равными массами и зарядами. Было проведено исследование процесса выравнивания ионной и электронной температур при различных отношениях масс, также исследовалась полностью ионизованная плазма изотопов водорода, т.е. система, состоящая из частиц с одинаковыми по величине

зарядами, но разными массами (электроны и однократно заряженные ионы).

Для моделирования методом молекулярной динамики был выбран кулоновский потенциал для описания взаимодействия частиц, поскольку кулоновский потенциал является хорошей моделью для плазмы инерционного термоядерного синтеза. Система уравнений движения заряженных частиц должна дополняться начальными и граничными условиями. В качестве граничных условий обычно используются зеркальные граничные условия или периодические, для которых иногда используется процедура суммирования Эвальда.

В наших расчетах начальное состояние выбрано сильно неравновесным, функция распределения электронов и ионов в начальный момент полагалось максвелловской с сильно различающимися температурами. При релаксации начального состояния происходит выравнивание температур. Причем плазма может находиться как в ловушке, так и разлетаться в вакуум - в любом случае, взаимодействие электронной и ионной подсистем приводит к выравниванию температур.

Постановка задачи

Рассмотрим некий объем, в котором в начальный момент времени содержатся два компонента с различными температурами: некоторое число электронов с позитронами для плазмы позитрония. Рассматривались системы с различным числом частиц $2N = 128, 512, 2048, 4096$ распределенных внутри счетной ячейки - куба с ребром L. Размеры куба выбирались из условия $nL^3 = N$, где n - числовая плотность ионов, которая задавалась равной $10^{12}\ см^{-3}$.

Начальные условия рассма-тривались двух типов. Первый, когда в начальный момент времени все частицы неподвижный и распределены равновероятно внутри счетной ячейки. Этот тип начальных условий соответствует экспериментам с ультрахолодной плазмой, создаваемой при селективной ионизации холодного газа. Он подробно рассмотрен в [24]. Второй тип начальных условий, это когда частицы в начальный момент времени распределены равновероятно в счетной ячейке, а их скорости имеют распределение Максвелла с различными температурами для положительно и отрицательно заряженных частиц.

Граничные условия были двух типов: зеркально отражающие стенки и периодические граничные условия. В случае периодических граничных условий учитывалось взаимодействие частиц только в одной ячейке, т.е. процедура суммирования Эвальда не использовалась.

Показатель неидеальности классической кулоновской системы определяется следующей формулой:

$$\Gamma = \frac{Z^2 e^2}{aT} \sim \frac{Z^2 n^{1/3}}{T} \qquad (1)$$

где $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ - радиус сферы Вигнера-Зейтца. Большие значения показателя неидеальности могут быть достигнуты различными способами: за счет большого заряда Z (заряд пылинки в плазме) [25]; высокой плотности ионов n (инерционный термоядерный синтез) [26]; низкой температуры T (ультрахолодная плазма) [27-28]. Для простоты будем рассматривать случай однократно заряженных ионов $Z = 1$.

Если предположить, что в начальный момент времени две компоненты плазмы имеют максвелловское распределение скоростей с различными температурами, то процесс выравнивания температур за счет кулоновских столкновений описывается уравнением [29]:

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{T_p - T_e}{\tau_{ep}}, \quad \frac{dT_p}{dt} = \frac{T_e - T_p}{\tau_{pe}}, \qquad (2)$$

в котором скорость релаксации температуры электронов определяется разностью температур и характерным временем релаксаций:

$$\tau_{ep} = \frac{1}{\nu_{ep}} = \frac{3 m_e m_p}{8\sqrt{2\pi} n_p e^4 \Lambda} \left(\frac{k_B T_e}{m_e} + \frac{k_B T_p}{m_p} \right)^{3/2}. \qquad (3)$$

Для определения времени релаксации температур электронов и ионов необходимо знание значения кулоновского логарифма Λ, который как известно, отражает дальнодействующий характер кулоновского взаимодействия и определяется следующим образом [29]:

$$\Lambda = \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}, \qquad (4)$$

где $b_{\max}$, $b_{\min}$ - максимальный и минимальный прицельный параметры. В качестве минимального прицельного параметра берется длина Ландау $b_c = Ze^2 / k_B T$ либо тепловая длина волны де-Бройля $\lambda\!\!\!^{-} = \sqrt{2\pi\hbar^2 / m_e k_B T_e}$, максимального - радиус Дебая.

Результаты расчетов выравнивания температур

Вначале рассмотрим влияние на процесс выравнивания температур в кулоновской системе следующих факторов: тип граничных условии и число частиц в системе. На рисунке 1, приложение 1 представлены графики зависимости температур электронов и ионов для двух типов граничных условии: верхняя панель - зеркальные; нижняя панель - периодические. Разные графики по горизонтали соответствуют различному числу частиц в системе $2N = 128, 512, 2048, 4096$.

Из приведенных рисунков следует что, имеется весьма сильная зависимость времени релаксации температур от типа граничных условии при малом числе частиц в системе. С увлечением числа частиц в системе, как и следовало ожидать, зависимость уменьшается. Отметим интересную особенность, что при малом числе частиц в системе с периодическими граничными условиями выравнивание температур происходит быстрее. Это связано, с тем, что если при зеркальных граничных условиях расстояние частицы до стенки значительно меньше среднего межчастичного расстояния $n^{-1/3}$, то среднее значение микрополя, действующего на частицу, $2^{2/3}$ раза меньше среднего микрополя.

Результаты расчетов автокорреляционных функции потоков

Рассмотрим автокорреляционные функции потоков положительно и отрицательно заряженных частиц (ионов и электронов).

Поскольку наша система в целом строго нейтральна и ее суммарный импульс равен нулью в периодической системе и колеблется около нулевого значения в системе с зеркальными граничными условиями, то будем рассматривать автокорреляционные функции для потока частиц только одного знака:

$$J(t) = \sum_i^N q_i v_i(t), \qquad (5)$$

где q_i, v_i - заряд и скорость i частицы, соответственно. Тогда, автокоррелятор потока частиц определяется формулой:

$$Z(\tau) = \langle J(0) \cdot J(\tau) \rangle \big/ \langle J^2(0) \rangle. \qquad (6)$$

Автокоррелятор потока является важной характеристикой рассматриваемой кулоновской системы. Его зависимость от числа частиц и типа граничных условии представляет большой методический интерес. Поэтому, были проведены расчеты с различным числом частиц и двумя типами граничных условии: зеркально отражающими и периодическими. На рисунке 2 (приложение 2) в верхней панели приведены зависимости автокорреляционных функций потока в кубе с зеркальными граничными условиями при числе частиц $2N = 128, 512, 2048, 4096$. На рисунке 2(приложение 2) в нижней панели представлены аналогичные графики для периодической системы. На всех рисунках сплошными кривыми представлены зависимость

$$Z(\tau) = \exp(-\tau\, \omega_{plasma}), \qquad (7)$$

где ω_{plasma} - плазменная частота. Сравнение рисунков в одной колонке показывает, что они не сильно отличаются друг от друга, т.е. зависимость АКФ потока от числа частиц довольно слабая. Но различие графиков в правой и левой колонке очень большое, т.е. зависимость от типа граничных условии очень сильная.

Другим интересным фактом, как видно на рисунках, является то, что время распада корреляции в системе с периодическими граничными условиями значительно больше и автокорреляционные функции носят более монотонный характер.

Для более явной демонстрации этого эффекта на рисунке 3 приведены зависимости автокорреляционных функции потока для системы с зеркальными граничными условиями в линейном масштабе.

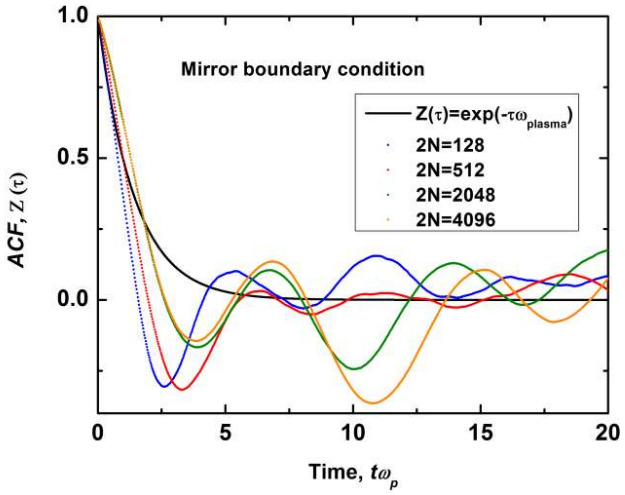

Рисунок 3 - Зависимости автокорреляционных функции потока для системы с зеркальными граничными условиями в линейном масштабе

На рисунке 4 в полулогарифмическом масштабе представлены аналогичные результаты для системы с периодическими граничными условиями.

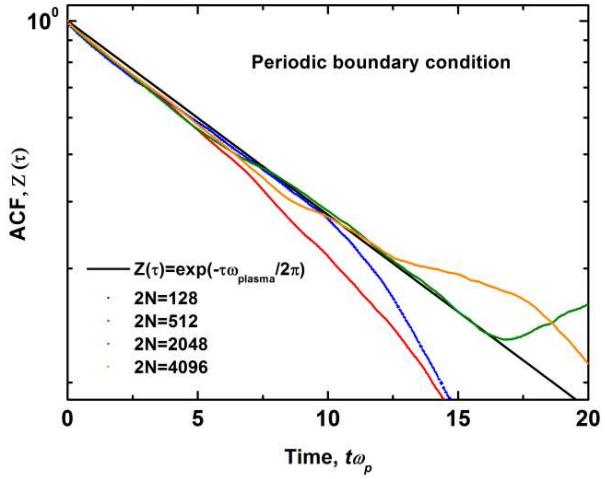

Рисунок 4 – Зависимости автокорреляционных функции потока для системы с периодическими граничными условиями в полулогарифмическом масштабе

Для системы с зеркальными граничными условиями сплошная кривая с зависимостью (6) демонстрирует, что начальные период АКФ хорошо описывается экспонентой с характерным временем распада корреляции $1/\omega_{plasma}$. Как следует из приведенного графика для системы с периодическими граничными условиями сплошная кривая с зависимостью $Z(\tau) = \exp(-\tau\,\omega_{plasma}/2\pi)$ показывает, что для такой системы характерная время распада корреляции с хорошей точностью совпадает в ленгмюрским периодом.

Заключение

В работе на основе метода молекулярной динамики рассмотрена задача о релаксации температур в классической кулоновской системы. Проведено исследование свойств такой системы в зависимости от числа частиц в ней, рассмотрены случаи зеркально отражающих и преиодических граничных условии.

При анализе автокорреляционных функции потока частиц одного знака в системе получены, что время распада корреляции в системе с зеркально отражающими граничными условиями имеют порядок величины обратной плазменной частоты, а для системы с периодическими граничными условиями - периода ленгмюрских колебаний. Также обнаружено, что в системе с периодическими граничными условиями время релаксации температур меньше, чем в системе с зеркально отражающими граничными условиями. Как следует из анализа результатов, влияние числа частиц на автокорреляционные функции потоков незначительно.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта AP05134366 Исследование фундаментальных свойств неидеальной комплексной плазмы на основе моделей взаимодействия частиц (2019).

Список литературы

1 Dimonte G. and Daligault J. Molecular-dynamics simulations of electron-ion temperature relaxation in a classical Coulomb plasma// Phys. Rev. Lett. - 2008. - Vol. 101. - P. 135001.

2 Benedict L. X., Glosli J. N., Richards D. F., Streitz F. H., Hau-Riege S. P., London R. A., Graziani F. R., Murillo M. S., and Benage J. F. Molecular Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Equilibration in an SF6 Plasma // Phys. Rev. Lett. - 2009. - Vol. 102. - P. 205004

3 Atzeni S., Meyer-ter-Vehn J., The Physics of Inertial Fusion. - Clarendon Press, Oxford, 2004. - p. 458.

4 Issanova M.K., Kodanova S.K., Ramazanov T.S. and Hoffmann D.H.H. Transport Properties of Inertial Confinement Fusion Dense Plasmas // Contrib. Plasma Phys. - 2016. - Vol. 56(5). - P. 425.

5 Xu B., Hu S.X. Effects of electron-ion temperature equilibration on inertial confinement fusion implosions // Phys. Rev. E -2011. - Vol. 84. - P. 016408.

6 Ng A. Outstanding questions in electron–ion energy relaxation, lattice stability, and dielectric function of warm dense matter// Int. J. Quantum Chem. - 2011. - Vol. 112. - P. 150.

7 Celliers P., Ng A., Xu G., Forsman A. Thermal equilibration in a shock wave // Phys. Rev. Lett. - 1992. - Vol. 68. - P. 2305.

8 Ng A. et al. Electron-ion equilibration in a strongly coupled plasma // Phys. Rev. E - 1995. - Vol. 52. - P. 4299.

9 Cho B.I. et al. Electronic Structure of Warm Dense Copper Studied by Ultrafast X-Ray Absorption Spectroscopy // Phys. Rev. Lett. - 2011. - Vol. 106. - P. 167601.

10 Goncharov V.N. et al. Demonstration of the Highest Deuterium-Tritium Areal Density Using Multiple-Picket Cryogenic Designs on OMEGA // Phys. Rev. Lett. - 2010. - Vo. 104. - P. 165001.

11 Brian W.J.M., Neil R.T. X-ray free-electron lasers // Nat. Photonics. - 2010. Vol. 4. - P. 814.

12 Lindl J.D. et al. Progress towards ignition on the National Ignition Facility // Nucl. Fusion. - 2011. - Vol. 51. - P. 094024.

13 Kodanova S.K., Issanova M.K., Amirov S.M., Ramazanov T.S., Tikhonov A., Moldabekov Z.A. Relaxation of non-isothermal hot dense plasma parameters // Matter Radiat. Extremes - 2018. - Vol. 3. - P. 40.

14 Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Issanova M.K., Nigmetova G.N., Moldabekov Z. Investigation of Coulomb Logarithm and Relaxation Processes in Dense Plasma on the Basis of Effective Potentials // Contrib. Plasma Phys. - 2015. - Vol. 55. - P. 271.

15 Zhao Y. A binary collision Monte Carlo model for temperature relaxation in multicomponent plasmas // AIP Advances. - 2018. - Vol. 8. - P. 075016.

16 Graziani F.R. et al. Large-scale molecular dynamics simulations of dense plasmas: The Cimarron Project // High. Energy Density Phys. - 2012. - Vol. 8. - P.105.

17 Hansen J.P., McDonald I.R. Thermal relaxation in a strongly coupled two-temperature plasma // Phys. Lett. - 1983. - Vol. - 97A. - P. 42.

18 Glosli J.N. et al. Molecular dynamics simulations of temperature quilibration in dense hydrogen // Phys. Rev. E. - 2008. - Vol. 78. - P. 025401(R).

19 Dharma-wardana M.W.C. Quantum Corrections and Bound-State Effects in the Energy Relaxation of Hot Dense Hydrogen // Phys. Rev. Lett. 2008. - Vol. 101. - P. 035002.

20 Ma Q., Dai J., Kang D., Zhao Z., Yuan J., Zhao X. Molecular dynamics simulation of electron–ion temperature relaxation in dense hydrogen: A scheme of truncated Coulomb potential // High Energy Density Physics. - 2014. - Vol. - 13. - P. 34-39.

21 Blancard C., Clerouin J., Faussurier G. Fast temperature relaxation model in dense plasmas // High. Energy Density Phys. - 2013. - Vol. - 9. - P. 247.

22 Vorberger J., Gericke D.O. Comparison of electron-ion energy transfer in dense plasmas obtained from numerical simulations and quantum kinetic theory // High. Energy Density Phys. - 2014. - Vol. 10. - P. 1.

23 Benedict L.X. et al. Molecular dynamics simulations and generalized Lenard-Balescu calculations of electron-ion temperature equilibration in plasmas // Phys. Rev. E. - 2012. - Vol. 86. - P. 046406.

24 Maiorov S.A. On the ultracold plasma evolution // Bulletin of the Lebedev Physics Institute. - 2014. - Vol. 41(3). - P. 81-87.

25 Fortov V.E., Petrov O.F., Vaulina O.S., Timirkhanov R.A. Viscosity of a Strongly Coupled Dust Component in a Weakly Ionized Plasma // Phys. Rev. Lett. - 2012. - Vol. 109. - P. 055002.

26 Hoffmann D. H. H., Blazevic A., Ni P., Rosmej O., Roth M., Tahir N. A., Tauschwitz A., Udrea S., Varentsov D., Weyrich K., Maron Y. Present and future perspectives for high energy density physics with intense heavy ion and laser beams // Laser Part. Beams. - 2005. - Vol. 23. - P. 47.

27 Maiorov S.A. Computation of temperature and pressure fluctuations in the Coulomb system // High Temperature. 2014. - Vol. 52 (4). - P. 609-611.

28 Maiorov S.A., Tkachev A.N., and Yakovlenko S.I. Unexpected properties of classical coulomb plasma revealed by computer simulation ab initio// Mat. Model. - 1992. - Vol. 4 (7). - P. 3.

L. Spitzer, Physics of Fully Ionized Gases. - Interscience, N.Y. - 1967.

Принято к печати 3.02.19

Приложение1

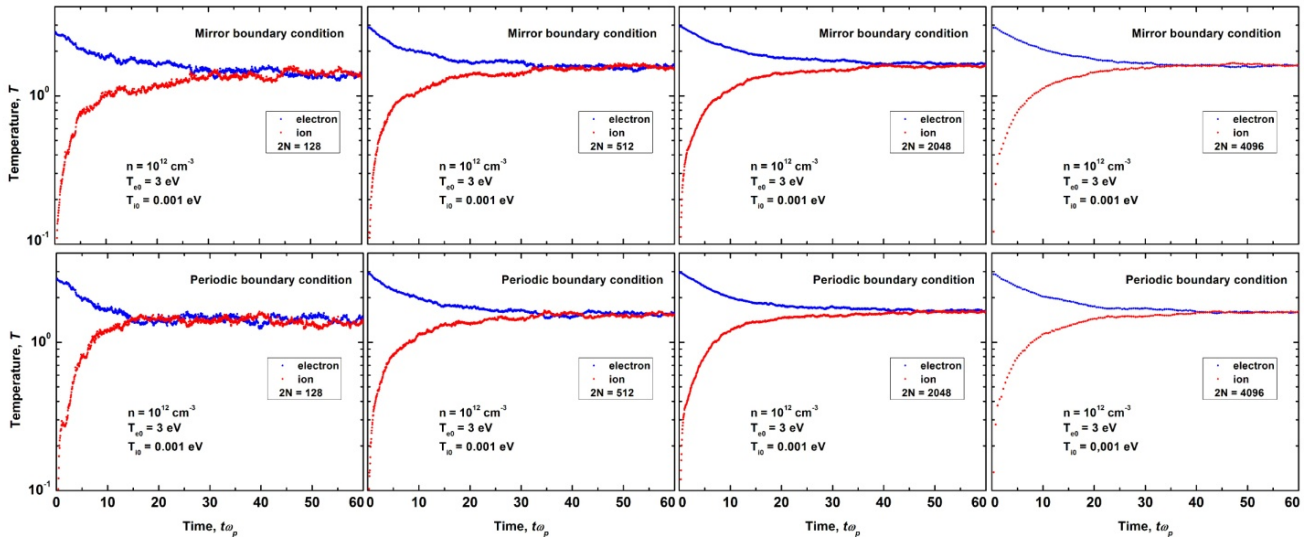

Рисунок 1 – Зависимости температур электронов и ионов для двух типов граничных условии и при различном числе частиц в системе: верхняя панель - зеркальные; нижняя панель - периодические.

Приложение 2

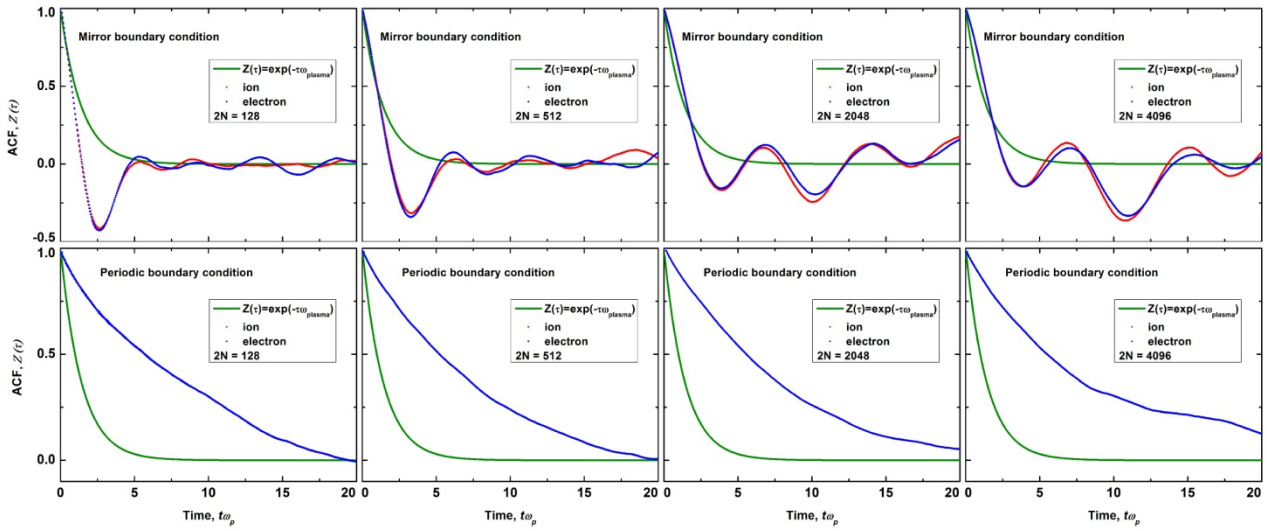

Рисунок 2 – Зависимости автокорреляционной функции потока для двух типов граничных условии и при различном числе частиц в системе: верхняя панель - зеркальные; нижняя панель - периодические; сплошная кривая - (7).

М.К. Исанова[1,*], С.К. Коданова[1], Т.С. Рамазанов[1], А.К. Хикметов[1], Р.И. Голятина[2], С.А. Майоров[2]
[1]НИИЭТФ, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан
[2]Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия
**e-mail: mayorov_sa@mail.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПЛАЗМЫ ПОЗИТРОНИЯ

Аннотация. В работе методом молекулярной динамики исследованы релаксационные свойства полностью ионизованной, горячей, идеальной плазмы. В качестве примера рассмотрена классическая задача о выравнивании электронной и ионной температур при различных соотношениях масс, определены времена релаксации температур, исследованы влияние числа частиц и типа граничных условии на результаты моделирования. Проведено сравнение полученных результатов с существующими теоретическими результатами. При анализе автокорреляционных функции потока частиц одного знака в системе получены, что время распада корреляции в системе с зеркально отражающими граничными условиями имеют порядок величины обратной плазменной частоты, а для системы с периодическими граничными условиями - периода ленгмюрских колебаний. Также обнаружено, что в системе с периодическими граничными условиями время релаксации температур меньше, чем в системе с зеркально отражающими граничными условиями. Как следует из анализа результатов, влияние числа частиц на автокорреляционные функции потоков незначительно.

Ключевые слова: плазма, классическая кулоновская система, кулоновский логарифм, релаксация температур, отношение масс, метод молекулярной динамики, периодические граничные условия, зеркальные граничные условия, автокорреляционная функция тока.

М.К. Исанова, С.К. Коданова, Т.С. Рамазанов, А.К. Хикметов, Р.И. Голятина, С.А. Майоров
[1]ЭТФҒЗИ, әл-ФарабиатындағыҚазақҰлттықУниверситеті, Алматы, Қазақстан
[2]Ресей ғылым академиясының А.М. Прохоров атындағы жалпы физика Институты, Мәскеу, Ресей
**e-mail: mayorov_sa@mail.ru*

ПОЗИТРОНИЙ ПЛАЗМАСЫН МОЛЕКУЛАЛЫҚ ДИНАМИКА ӘДІСІМЕН МОДЕЛЬДЕУ

Аннотация. Жұмыста молекулярлық динамика әдісі арқылы плазманың иондалған, ыстық, керемет релаксациялық қасиеттері толығымен зерттелді. Мысалы, әр түрлі массалардағы электрондардың және иондардың температуралық қалыптасуының классикалық мәселесі қарастырылған, температура релаксациясының уақыты анықталған, сондай-ақ бөлшектер санының әсері және шекаралық шарттар түрлеріне модельдеу нәтижелері келтірілген. Алынған нәтижелер теориялық нәтижелермен салыстырылды. Жүйеде бір бөлшектердің ағынының автокорреляциялық функцияларын талдай отырып, шекаралық жағдайды айқындайтын жүйеде корреляциялық ыдырау уақытына Лэнгмюрдің ауытқу кезеңі, өзара плазма жиілігі және периодтық шекаралық шарттар анықталады. Сонымен қатар, периодтық шекаралық шарттармен жүйеде температураға қатысты релаксация уақыты шекаралық шарттарды анықтайтын жүйеге қарағанда қысқа. Нәтижелерді талдау кезінде ағынның автокорреляциялық функциясына бөлшектер санының әсері шамалы.

Түйін сөздер: плазма, классикалық кулондық жүйе, кулондық логарифм, температура релаксациясы, масса қатынасы, молекулалық динамика, периодтық шекаралық шарттар, айналық шекаралық шарттар, ток ағымының автокорреляциялық функциясы.

M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, A.K. Khikmetov, R.I. Golyatina, S.A. Maiorov
[1]*IETP, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan*
[2]*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*
**e-mail: mayorov_sa@mail.ru*

SIMULATION OF POSITRONIUM PLASMA BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Abstract. In this paper, the relaxation properties of a fully ionized, hot, ideal plasma have been studied using the molecular dynamics method. As an example, a classical problem of equalization of the electron and positron temperatures for various mass ratios is considered, the relaxation times for temperatures are determined, and the influence of the number of particles and the type of boundary conditions on the simulation results is studied. The simulation results are compared with the available theoretical results. In this paper the molecular dynamics method has been used to study the problem of temperature relaxation in a classical Coulomb system. The dependence of the properties of such a system on the number of particles has been studied, and the cases of mirror and periodical boundary conditions have been considered. The analysis of the autocorrelation functions of the flux of particles of the same sign in the system showed that the correlation decay time in a system with mirror boundary conditions is reciprocal to the plasma frequency, and in a system with periodic boundary conditions it has the order of the Langmuir oscillation period. It was also found that in a system with periodic boundary conditions, the temperature relaxation time is shorter than in a system with mirror boundary conditions. follows from the analysis of the results, the influence of the number of particles on the autocorrelation flux functions is insignificant.

Keywords: plasma, classical Coulomb system, Coulomb logarithm, temperature relaxation, mass ratio, molecular dynamics method, periodic boundary conditions, mirror boundary conditions, autocorrelation flow function.