

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО- ОГРАНИЧЕННОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

Igor Morozov<sup>1</sup>, Thomas Raitza<sup>2</sup>, Heidi Reinholz<sup>2</sup>, Gerd Röpke<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва*

<sup>2</sup>*Rostock University, Rostock, Germany*



30 ноября 2009г.

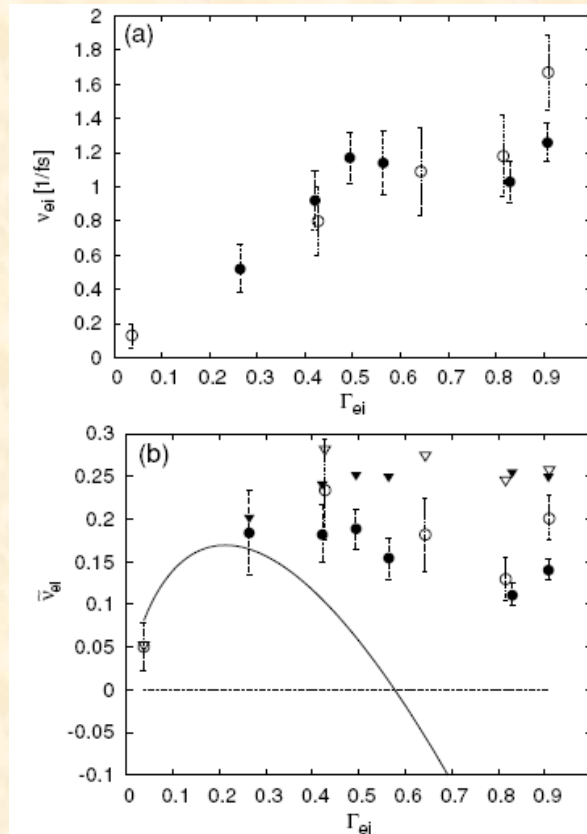
# Содержание

- Генерация неидеальной лазерной плазмы при ионизации наноразмерных металлических кластеров лазерными импульсами умеренной интенсивности.
- Постановка численного молекулярно-динамического моделирования кластеров Na.
- Спектр автокоррелятора тока для квазиравновесной электронной компоненты кластера.
- Исследование колебаний электронного облака.

# Анализ экспериментальных данных

Lora Ramunno, Christian Jungreuthmayer, Heidi Reinholz, Thomas Brabec  
Probing attosecond kinetic physics in strongly coupled plasmas  
*J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** (2006) 4923–4931

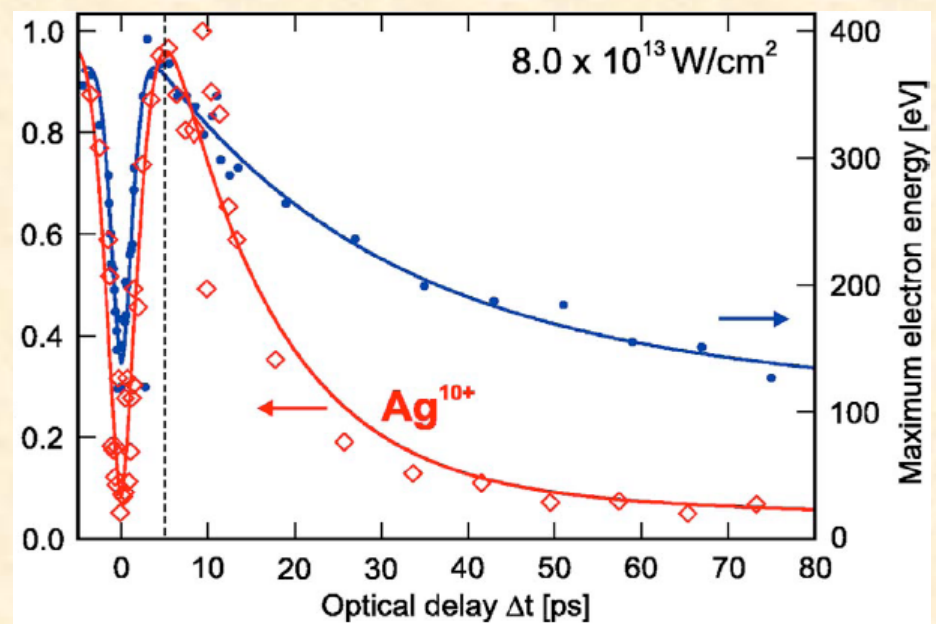
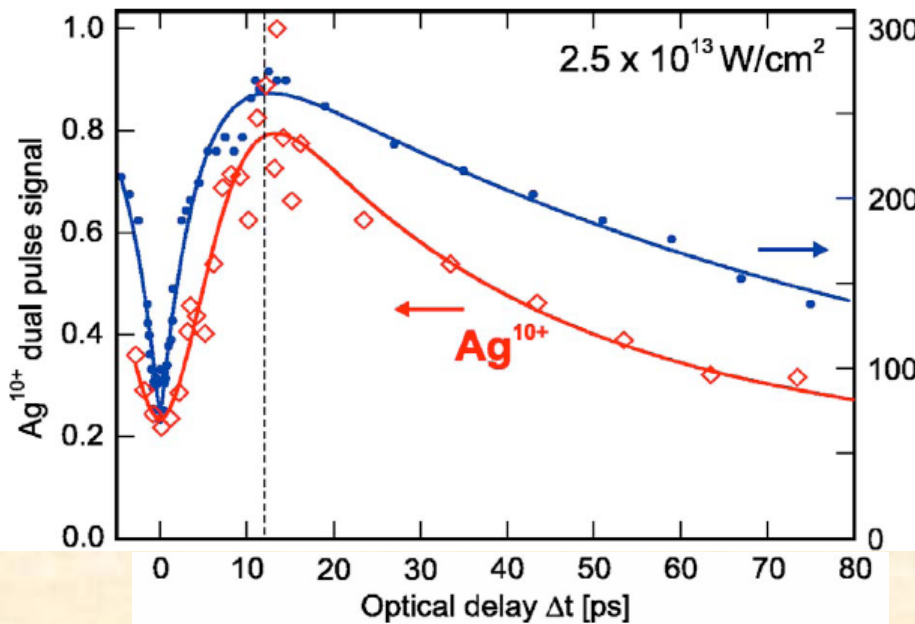
- Varying the intensity from  $10^{16}$  to  $2 \cdot 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> results in nanoplasmas with  $\Gamma_{ei}$  between 0.1 and 1.
- **Tree MD** simulations
- To eliminate numerical heating, we use shielded electron and ion Coulomb potentials with a shielding radius of **1 Bohr**.
- Classical approach of modelling **bound-state dynamics** in a SCP.



**Figure 3.** (a) Electron–ion collision frequency  $\nu_{ei}$  versus  $\Gamma_{ei}$  for the Xe<sub>5000</sub> (filled circles) and Xe<sub>500</sub> (open circles) nanoplasmas of figure 1. (b) Normalized electron–ion collision frequency  $\bar{\nu}_{ei}$  versus  $\Gamma_{ei}$  obtained from our simulated results (filled and open circles, respectively), the Born formula (filled and open triangles, respectively) and the Spitzer formula (solid line).

# Экспериментальные работы

T. Döppner, Th. Fennel, P. Radcliffe, J. Tiggesbäumker, and K.-H. Meiwes-Broer  
Ion and electron emission from silver nanoparticles in intense laser fields  
*Phys. Rev. A* **73**, 031202R (2006)



Comparison of the  $\text{Ag}^{10+}$  yield diamonds, left axis with the maximum kinetic energy  $E_{\text{max}}$  of the emitted electrons dots, right axis following dual pulse excitation of large  $\text{Ag}_N$  at a laser intensity of  $2.5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$  (upper panel) and  $8.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ , respectively. The lines are guide to the eye fits. Both the electron and the ion signals exhibit a strong dynamics and their maxima occur nearly simultaneously (see dashed vertical lines), irrespective of the laser intensity.

# Нагрев и разлет кластера

## Начальное состояние кластера

- Электроны неподвижны и находятся «на ионах»
- Атомы Na образуют правильный кристалл:



$N_i = 55$  – 3 оболочки  
 $N_i = 147$  – 4 оболочки  
 $N_i = 309$  – 5 оболочек

## Параметры лазерного импульса

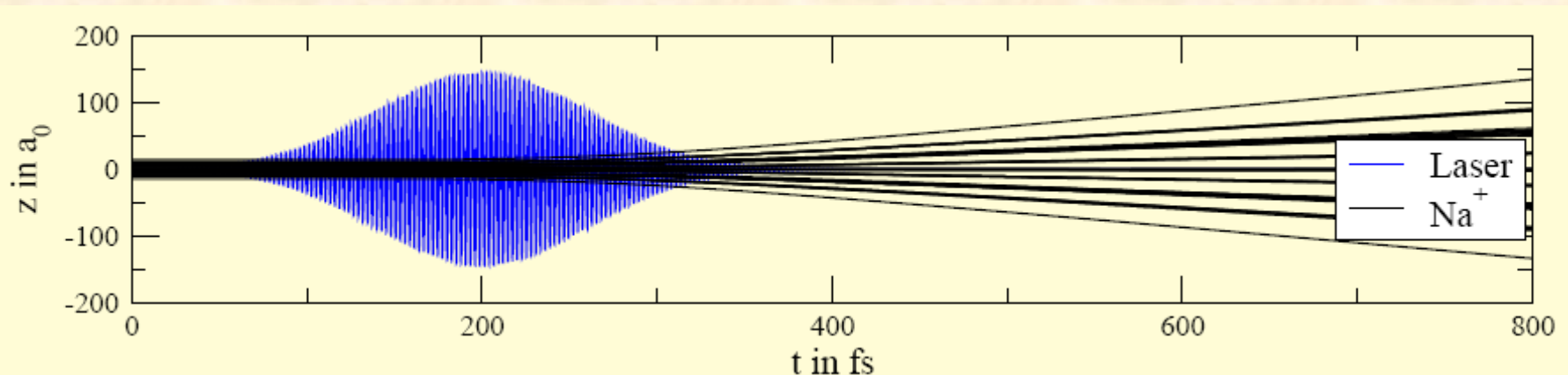
$$I = 5 \cdot 10^{12} \text{ Вт/см}^2$$

$$\lambda = 436.6 \text{ нм}$$

$$\tau = 50 \text{ фс}$$

**Отн. масс:**  $M/m = 41910$

## Разлет кластера после взаимодействия с импульсом



# Нагрев и разлет кластера

## Начальное состояние кластера

- Электроны неподвижны и находятся «на ионах»
- Атомы Na образуют правильный кристалл:

$N_i = 55$  – 3 оболочки  
 $N_i = 147$  – 4 оболочки  
 $N_i = 309$  – 5 оболочек



## Параметры лазерного импульса

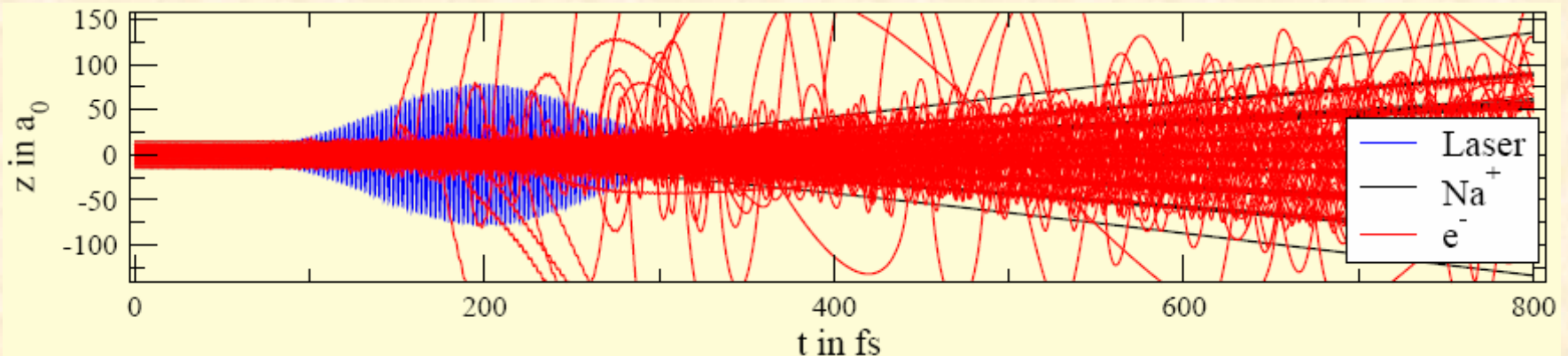
$$I = 5 \cdot 10^{12} \text{ Вт/см}^2$$

$$\lambda = 436.6 \text{ нм}$$

$$\tau = 50 \text{ фс}$$

**Отн. масс:**  $M/m = 41910$

## Разлет кластера после взаимодействия с импульсом



# Параметры плазмы в различные моменты времени после ионизации кластера $\text{Na}_{55}$

$t$ , fs	$r_{\text{rms}}$ , nm	$n_i$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$n_e$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$T_e$ , eV	$\Gamma$	$\Theta$
100	0.85	21.5	17.2	1.23	4.89	0.50
150	0.98	14.0	11.2	0.94	5.51	0.52
200	1.17	8.17	6.68	0.77	5.72	0.59
250	1.40	4.80	4.02	0.72	5.11	0.78
300	1.64	2.97	2.48	0.59	5.34	0.88

Эффективный размер кластера:  $r_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{5}{2N_i} \sum_{k=1}^{N_i} r_k^2}$



Параметр неидеальности:  $\Gamma_e = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{1/3} \frac{e^2}{kT}$

Параметр вырождения:  $\Theta = \frac{k_B T_e}{\varepsilon_F} = \frac{2m_e k_B T_e}{(2\pi n_e)^{2/3} \hbar^2}$

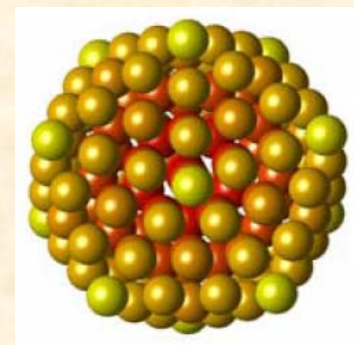
# Параметры плазмы в различные моменты времени после ионизации кластера $\text{Na}_{147}$

$t$ , fs	$r_{\text{rms}}$ , nm	$n_i$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$n_e$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$T_e$ , eV	$\Gamma$	$\Theta$
100	1.20	20.2	14.7	2.67	2.13	1.22
150	1.50	10.5	7.84	2.08	2.22	1.44
200	1.91	5.07	3.89	1.64	2.23	1.81
250	2.37	2.63	2.07	1.24	2.38	2.09
300	2.87	1.48	1.18	1.01	2.44	2.46

Эффективный размер кластера:  $r_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{5}{2N_i} \sum_{k=1}^{N_i} r_k^2}$

Параметр неидеальности:  $\Gamma_e = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{1/3} \frac{e^2}{kT}$

Параметр вырождения:  $\Theta = \frac{k_B T_e}{\varepsilon_F} = \frac{2m_e k_B T_e}{(2\pi n_e)^{2/3} \hbar^2}$





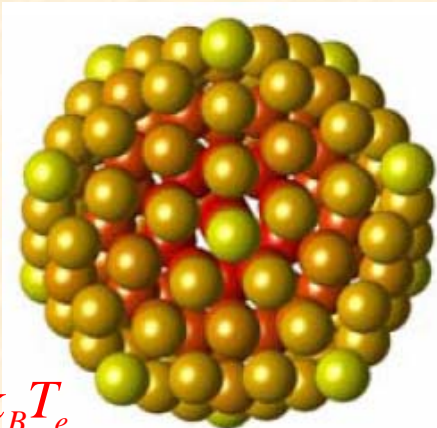
# Параметры плазмы в различные моменты времени после ионизации кластера $\text{Na}_{309}$

$t$ , fs	$r_{\text{rms}}$ , nm	$n_i$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$n_e$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$T_e$ , eV	$\Gamma$	$\Theta$
100	1.50	22.0	18.5	2.97	2.07	1.16
150	1.72	14.5	12.4	2.41	2.23	1.24
200	2.04	8.73	7.46	1.87	2.43	1.34
250	2.42	5.24	4.54	1.54	2.49	1.55
300	2.83	3.26	2.86	1.26	2.61	1.72

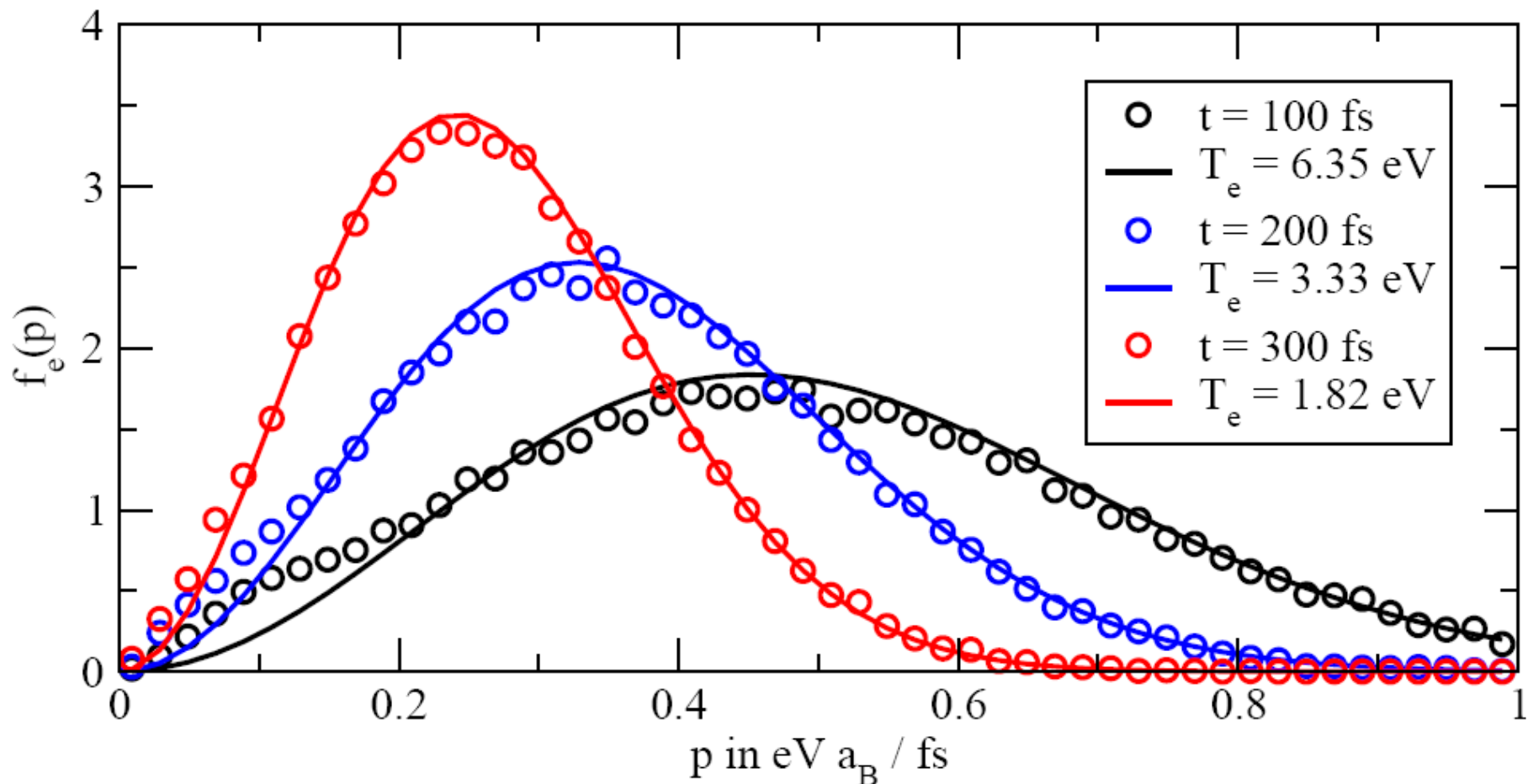
Эффективный размер кластера:  $r_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{5}{2N_i} \sum_{k=1}^{N_i} r_k^2}$

Параметр неидеальности:  $\Gamma_e = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{1/3} \frac{e^2}{kT}$

Параметр вырождения:  $\Theta = \frac{k_B T_e}{\varepsilon_F} = \frac{2m_e k_B T_e}{(2\pi n_e)^{2/3} \hbar^2}$



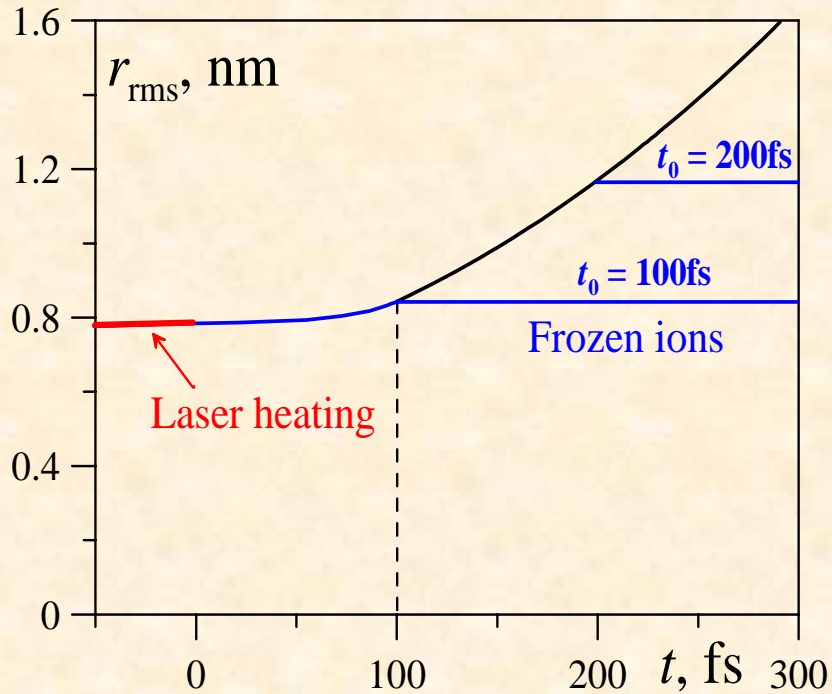
# Распределение электронов по скоростям в различные моменты времени



# Фиксация ионов для изучения плазмы на определенном этапе разлета кластера

Эффективный размер кластера:

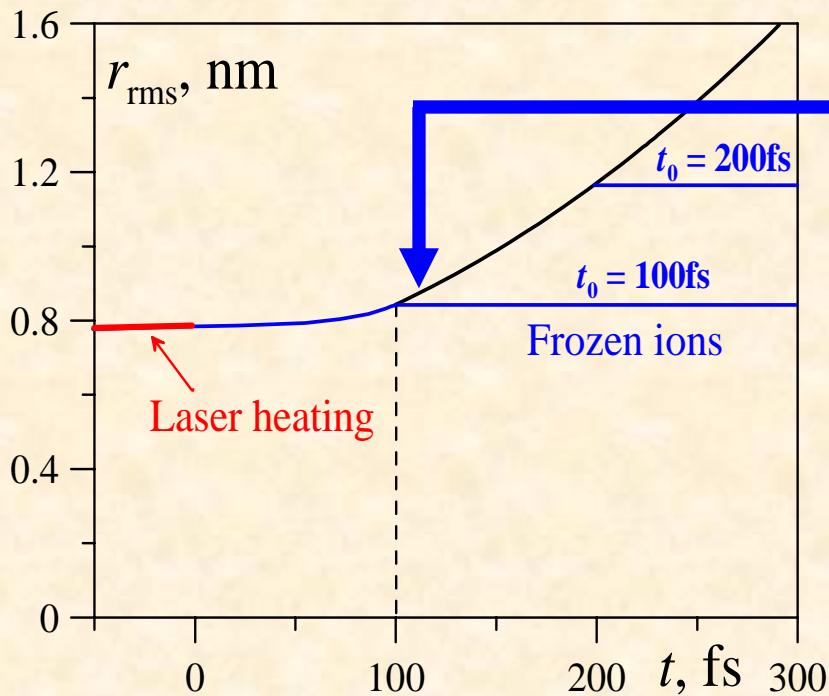
$$r_{rms} = \sqrt{\frac{5}{3} \sum_{i=1}^{N_i} r_i^2}$$



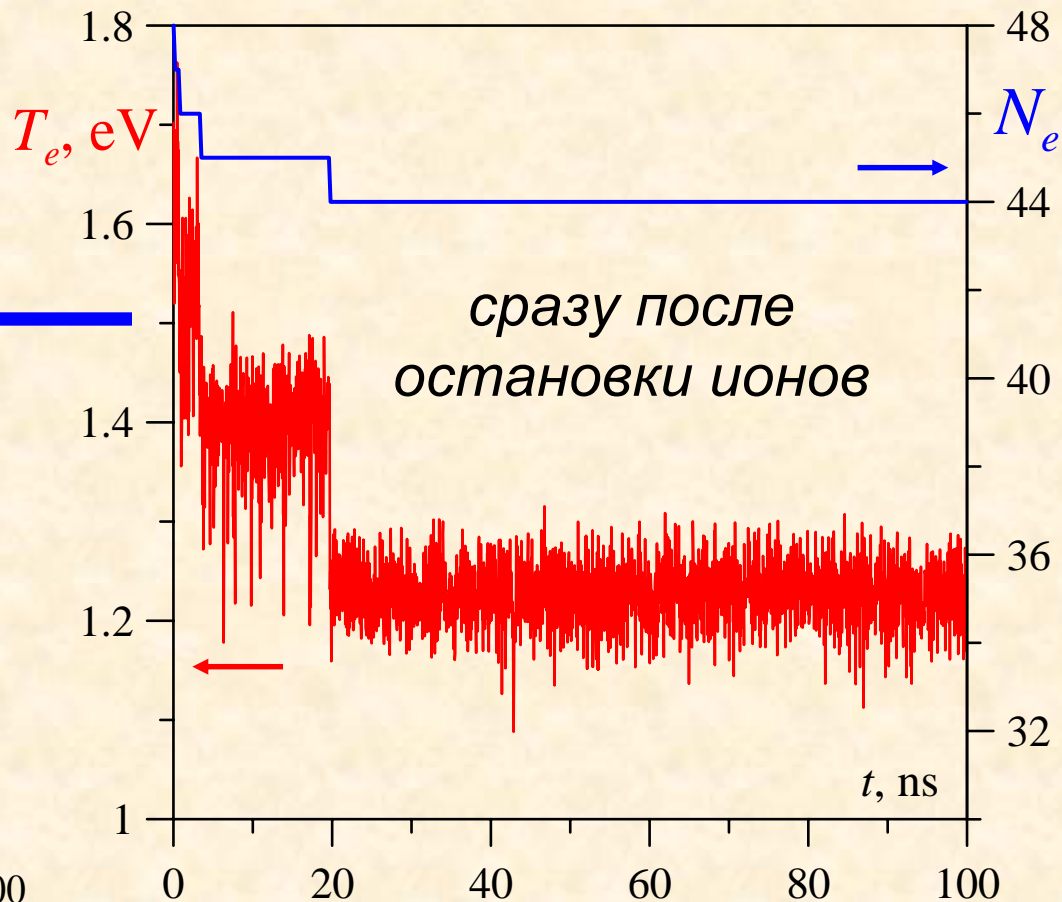
# Фиксация ионов для изучения плазмы на определенном этапе разлета кластера

Эффективный размер кластера:

$$r_{rms} = \sqrt{\frac{5}{3} \sum_{i=1}^{N_i} r_i^2}$$



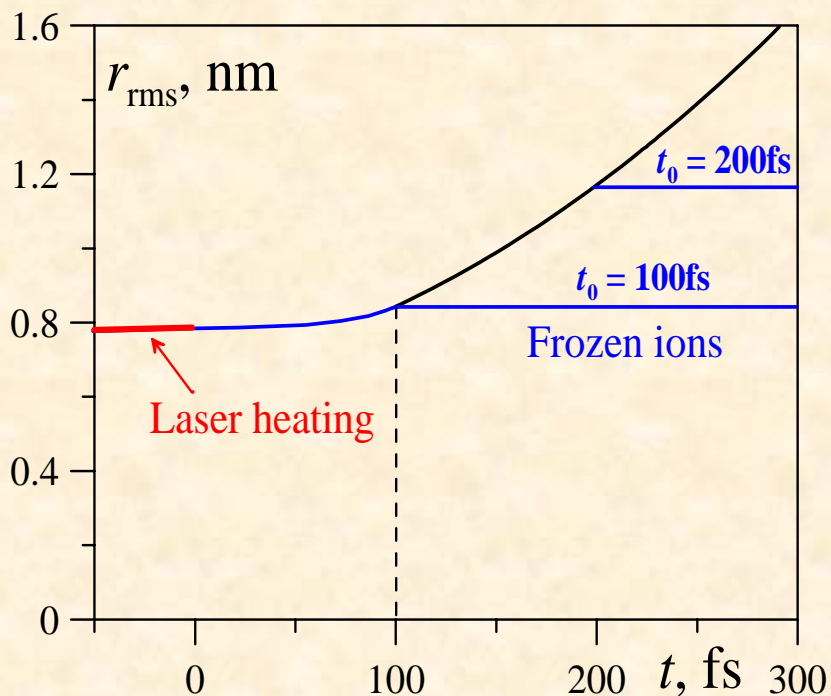
Температура и число электронов внутри  $r < 20r_{rms}$



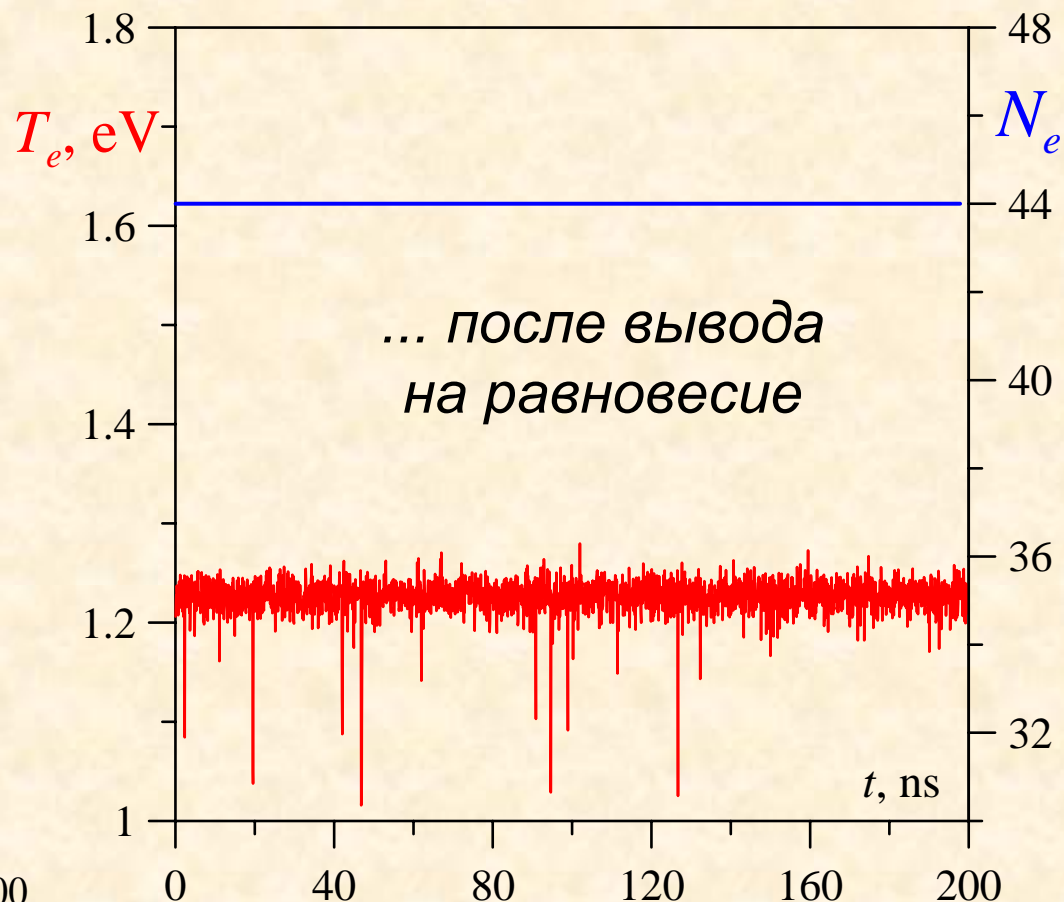
# Фиксация ионов для изучения плазмы на определенном этапе разлета кластера

Эффективный размер кластера:

$$r_{rms} = \sqrt{\frac{5}{3} \sum_{i=1}^{N_i} r_i^2}$$



Температура и число электронов внутри  $r < 20r_{rms}$



# Проводимость и эффективная частота столкновений

$$\mathbf{J}(t) = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i(t)$$

$$K(t) = \frac{\langle \mathbf{J}(0)\mathbf{J}(t) \rangle}{\langle \mathbf{J}^2(0) \rangle}$$

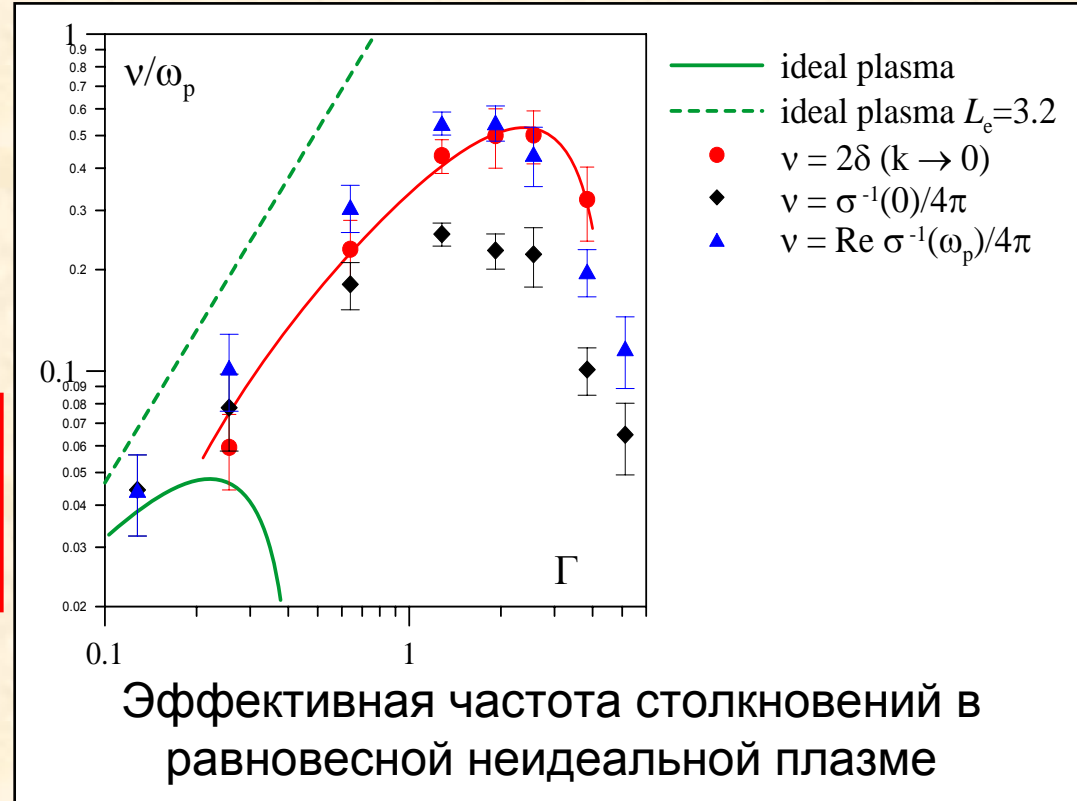
$$K(\omega) = \omega_p \int_0^{\infty} K(t) e^{-i\omega t} dt$$

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p}{4\pi} K(\omega)$$

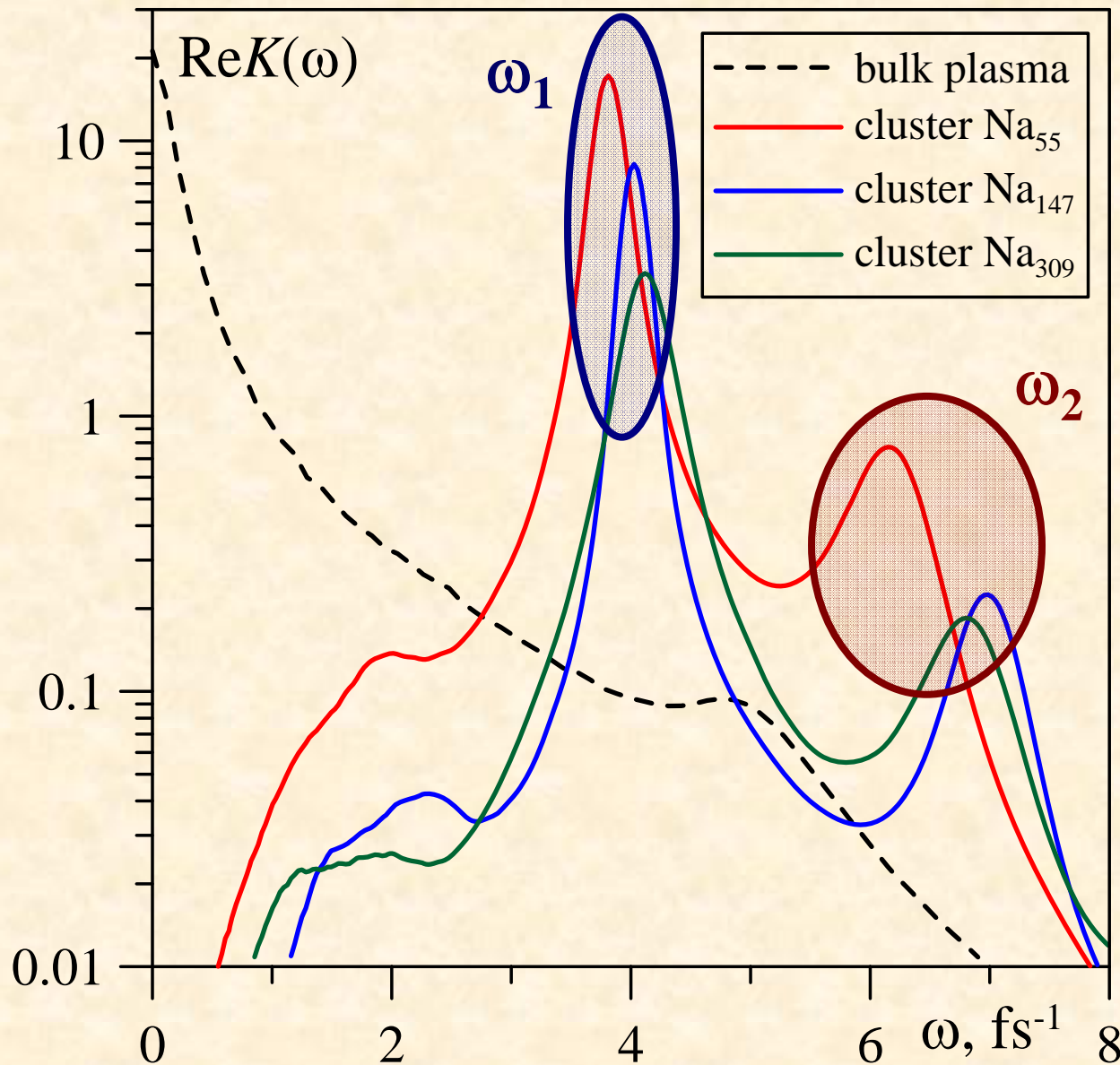
$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{1}{\nu(\omega) - i\omega}$$

$$\frac{\sigma(0)}{\omega_p} = \frac{\omega_p}{\nu(0)}$$

Обобщенная  
формула  
Друде



# Фурье образ коррелятора тока



Nonideality  
parameter  
 $\Gamma = 2$

# Частоты основных мод колебаний

**Na<sub>55</sub>**

$t$ , fs	$n_e$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$T_e$ , eV	$\omega_1$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{Mie}}$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{theor}}$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_2$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{pl}}$ , $\text{fs}^{-1}$
100	17.2	1.23	3.80	4.78	3.81	6.16	7.40
150	11.2	0.94	3.10	3.85	3.12	5.27	5.97
200	6.68	0.77	2.40	2.94	2.43	4.63	4.61
250	4.02	0.72	1.90	2.26	1.98	—	3.58
300	2.48	0.59	1.63	1.76	1.67	—	2.81

**Na<sub>309</sub>**

$t$ , fs	$n_e$ , $10^{21}\text{cm}^{-3}$	$T_e$ , eV	$\omega_1$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{Mie}}$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{theor}}$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_2$ , $\text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{pl}}$ , $\text{fs}^{-1}$
100	18.5	2.97	4.12	4.83	4.12	6.80	7.67
150	12.4	2.41	3.10	3.93	3.93	5.38	6.28
200	7.46	1.87	2.31	3.04	3.04	4.13	4.87
250	4.54	1.54	1.75	2.36	2.36	3.22	3.80
300	2.86	1.26	1.35	1.86	1.86	—	3.02

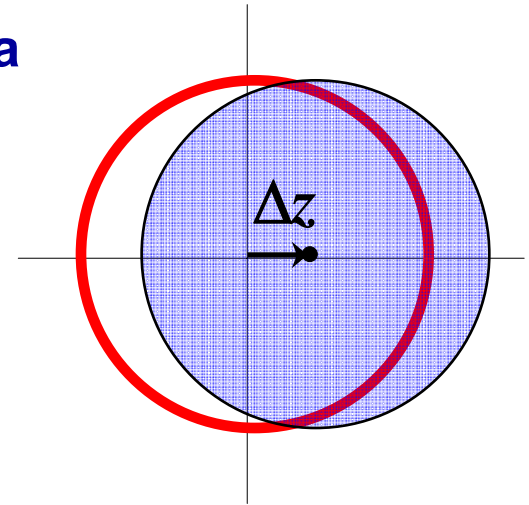


# Расчет частоты коллективных колебаний

## Частота малых колебаний электронного облака

$$\Delta U = \iiint n(\vec{r}) V(\vec{r} - z\vec{e}_z) d^3\vec{r}$$

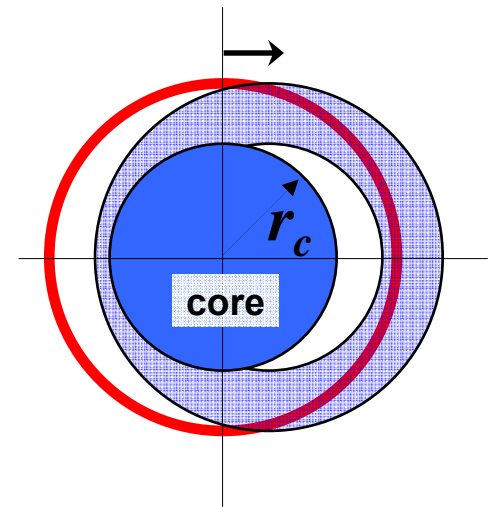
$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{1}{m} \left. \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right|_{z=0} = \frac{2\pi}{m} \int_0^\infty n(r) r^2 dr \int_{-1}^1 \left[ V''(r) t^2 + \frac{V'(r)}{r} (1 - t^2) \right] dt \\ &= \frac{4\pi}{3m} \int_0^\infty n(r) \left[ V''(r) + \frac{2V'(r)}{r} \right] r^2 dr. \end{aligned}$$



## Электронная плотность

$$n_e(r) = n_{core}(r) + n_{out}(r),$$

$$n_{core}(r) = \begin{cases} n_e(r), & r \leq r_c, \\ 0, & r > r_c, \end{cases} \quad n_{out}(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_c, \\ n_e(r), & r > r_c. \end{cases}$$



## Суммарный потенциал внутренних электронов

$$\begin{aligned} V_\alpha(r) &= -2\pi e q_\alpha \int_0^\infty n_\alpha(r_1) r_1^2 dr_1 \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 r t + r^2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 r t + r^2}}{\sigma}\right) \\ &= -\frac{2\pi e q_\alpha}{r} \int_0^\infty n_\alpha(r_1) \left[ (r + r_1) \operatorname{erf}\left(\frac{r + r_1}{\sigma}\right) - |r - r_1| \operatorname{erf}\left(\frac{|r - r_1|}{\sigma}\right) - \frac{2\sigma}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r^2 + r_1^2}{\sigma^2}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2rr_1}{\sigma^2}\right) \right] r_1 dr_1. \end{aligned}$$

# Частоты основных мод колебаний

**Na<sub>55</sub>**

$t, \text{fs}$	$n_e, 10^{21} \text{cm}^{-3}$	$T_e, \text{eV}$	$\omega_1, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{Mie}}, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{theor}}, \text{fs}^{-1}$	$\omega_2, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{pl}}, \text{fs}^{-1}$
100	17.2	1.23	3.80	4.78	3.81	6.16	7.40
150	11.2	0.94	3.10	3.85	3.12	5.27	5.97
200	6.68	0.77	2.40	2.94	2.43	4.63	4.61
250	4.02	0.72	1.90	2.26	1.98	—	3.58
300	2.48	0.59	1.63	1.76	1.67	—	2.81

**Na<sub>309</sub>**

$t, \text{fs}$	$n_e, 10^{21} \text{cm}^{-3}$	$T_e, \text{eV}$	$\omega_1, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{Mie}}, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{theor}}, \text{fs}^{-1}$	$\omega_2, \text{fs}^{-1}$	$\omega_{\text{pl}}, \text{fs}^{-1}$
100	18.5	2.97	4.12	4.83	4.12	6.80	7.67
150	12.4	2.41	3.10	3.93	3.93	5.38	6.28
200	7.46	1.87	2.31	3.04	3.04	4.13	4.87
250	4.54	1.54	1.75	2.36	2.36	3.22	3.80
300	2.86	1.26	1.35	1.86	1.86	—	3.02

# Исследование структуры колебаний электронного облака

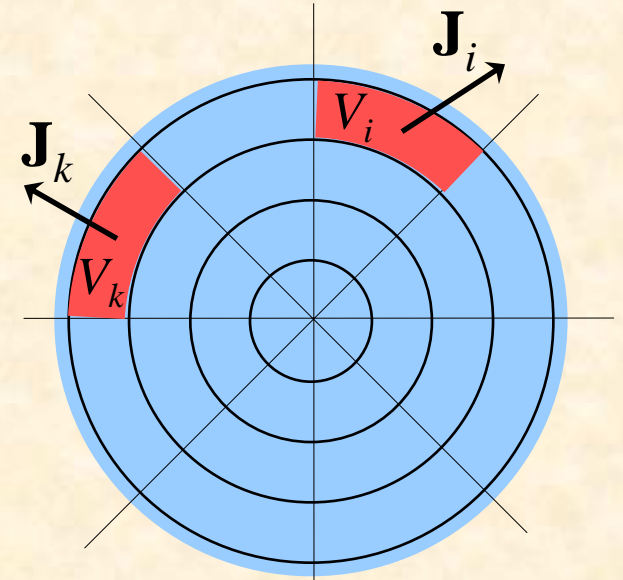
Кросс-корреляторы плотности тока:

$$K_{ik}(t) = \frac{\langle \mathbf{j}_i(0) \mathbf{j}_k(t) \rangle}{\langle \mathbf{j}_{tot}^2(0) \rangle}, \quad \mathbf{j}_i(t) = \frac{\mathbf{J}_i(t)}{\Delta V_i}$$

$$\text{Re } K_{ik}(\omega) = \omega_p \int_0^{\infty} K_{ik}(t) \cos(\omega t) dt$$

Матрица кросс-корреляторов:

$$\hat{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \text{Re } K_{11}(\omega) & \cdots & \text{Re } K_{1M}(\omega) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Re } K_{M1}(\omega) & \cdots & \text{Re } K_{MM}(\omega) \end{pmatrix}$$



Типичное разбиение:

$$M_r = 8, M_\theta = 4, M_\varphi = 4,$$

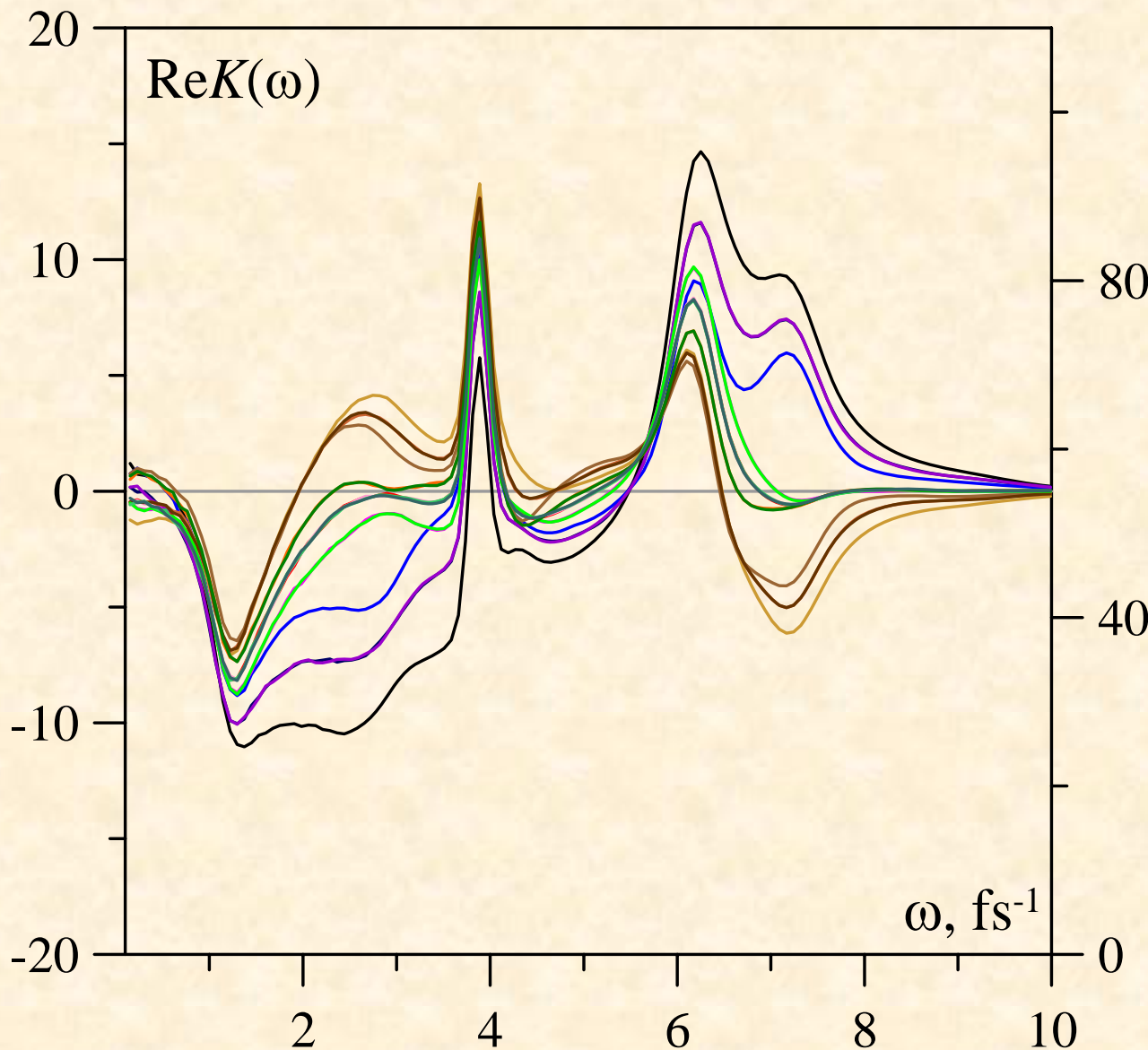
$$M = M_r M_\theta M_\varphi = 128$$

Задача на собственные значения:

$$\hat{\mathbf{K}} \psi_m = \lambda_m \psi_m \quad \Rightarrow \quad \psi_m(r, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \psi_{r_1, \theta_1, \varphi_1} \\ \vdots \\ \psi_{r_{M_r}, \theta_{M_\theta}, \varphi_{M_\varphi}} \end{pmatrix}$$

спектр  
пространственных  
мод

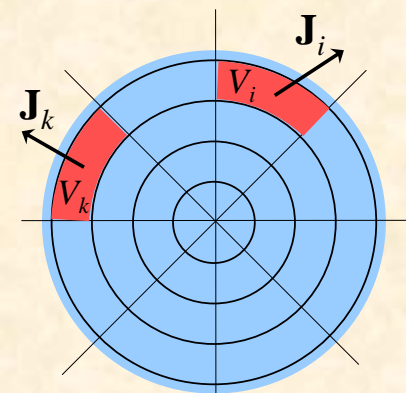
# Примеры кросс-корреляторов тока



Кросс-корреляторы  
для фиксированного  
 $\Delta r = 0$   
и различных  
 $\Delta\theta, \Delta\varphi$

$$K(t) = \frac{\langle \mathbf{j}_{r,\theta,\varphi}(0) \mathbf{j}_{r+\Delta r,\theta+\Delta\theta,\varphi+\Delta\varphi}(t) \rangle}{\langle \mathbf{j}_{\text{tot}}^2(0) \rangle}$$

$$\text{Re } K(\omega) = \omega_p \int_0^{\infty} K(t) \cos(\omega t) dt$$

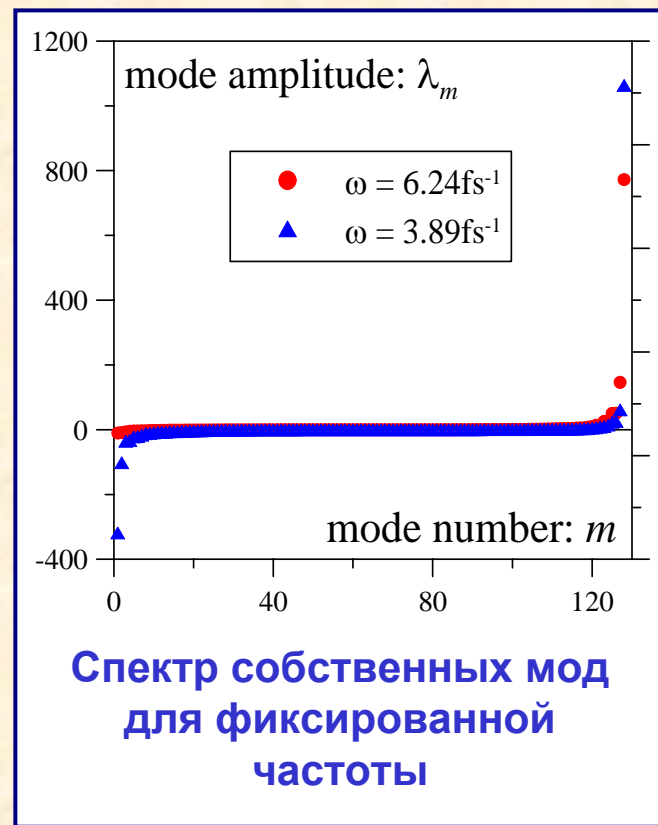
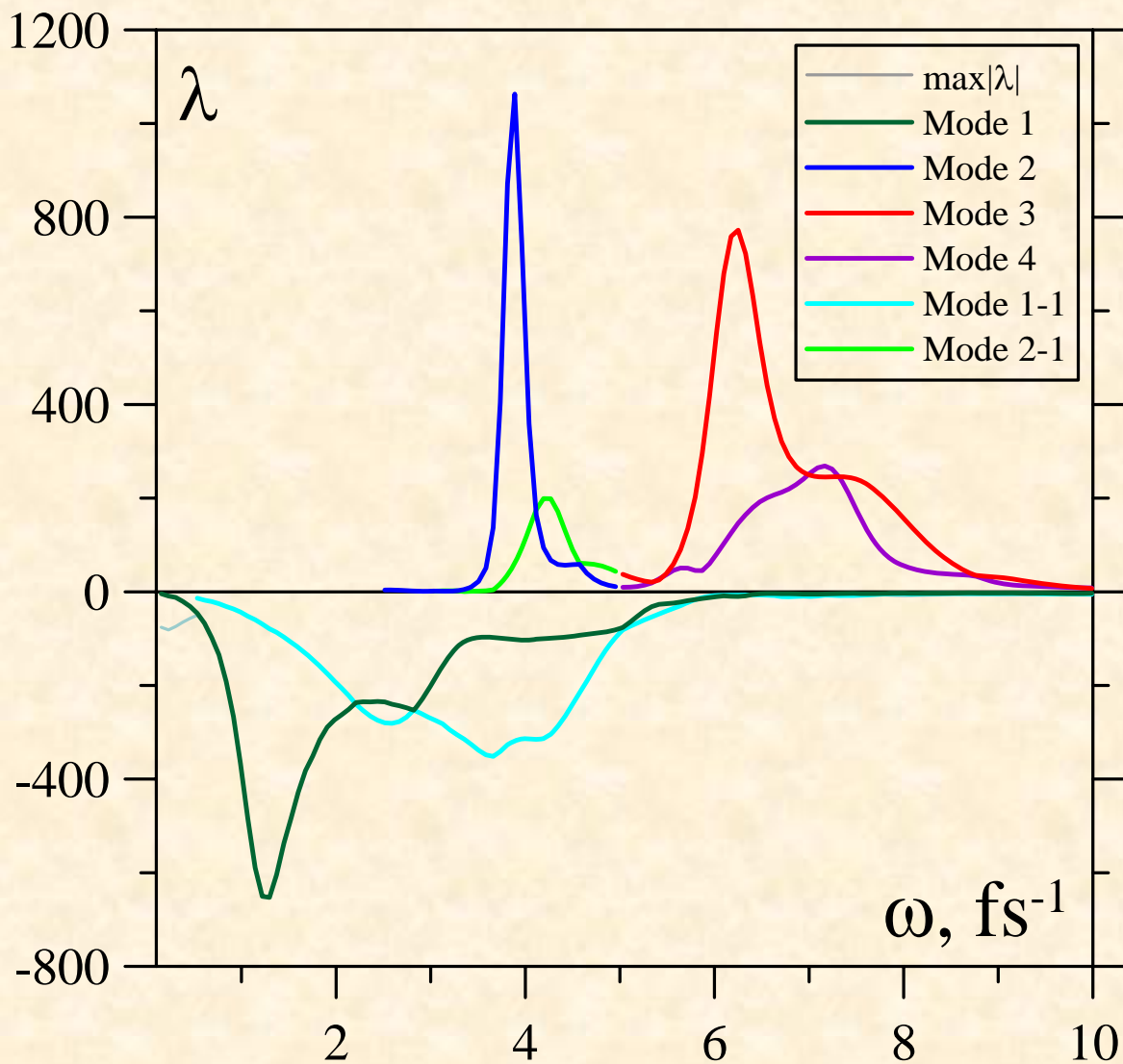


Типичное разбиение:

$$M_r = 8, M_\theta = 4, M_\varphi = 4,$$

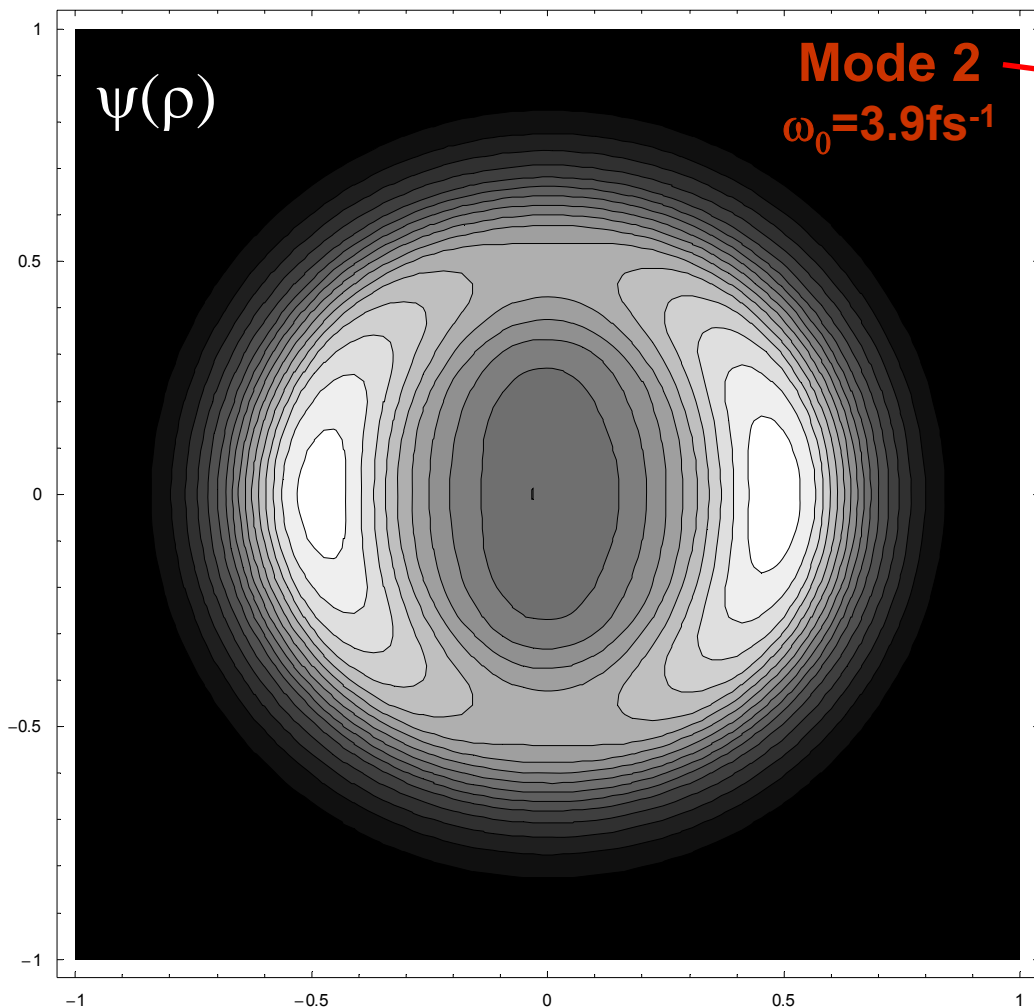
$$M = M_r M_\theta M_\varphi = 128$$

# Зависимость амплитуды моды от частоты

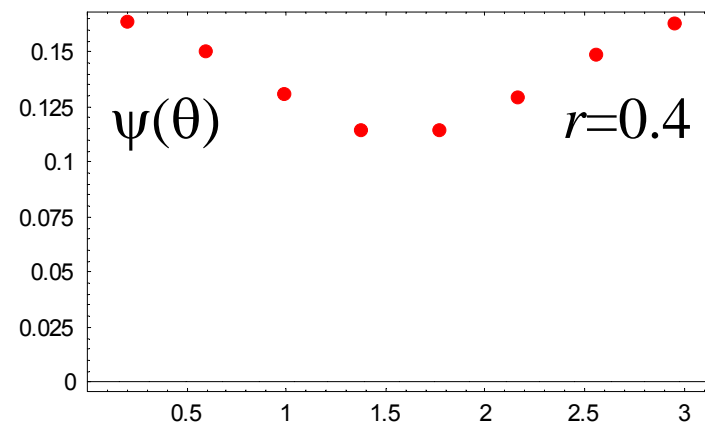
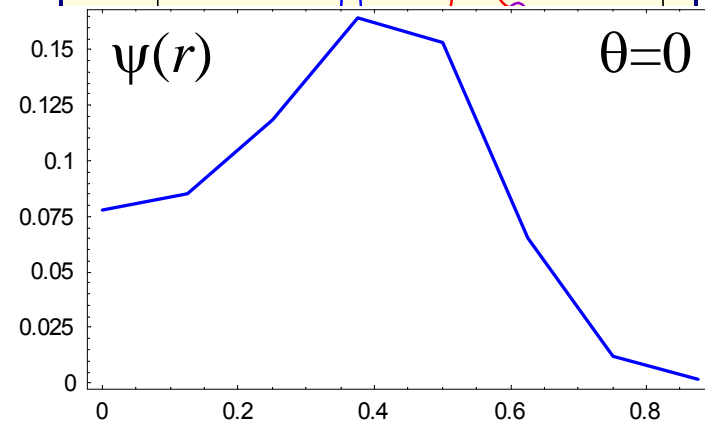
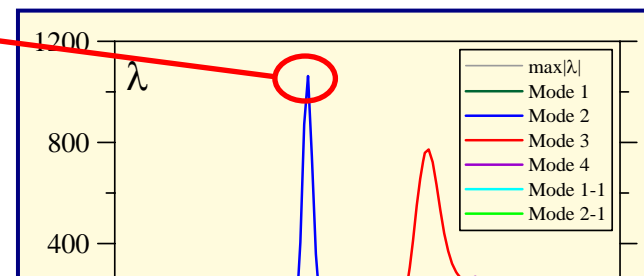


**Спектр собственных мод  
для фиксированной  
частоты**

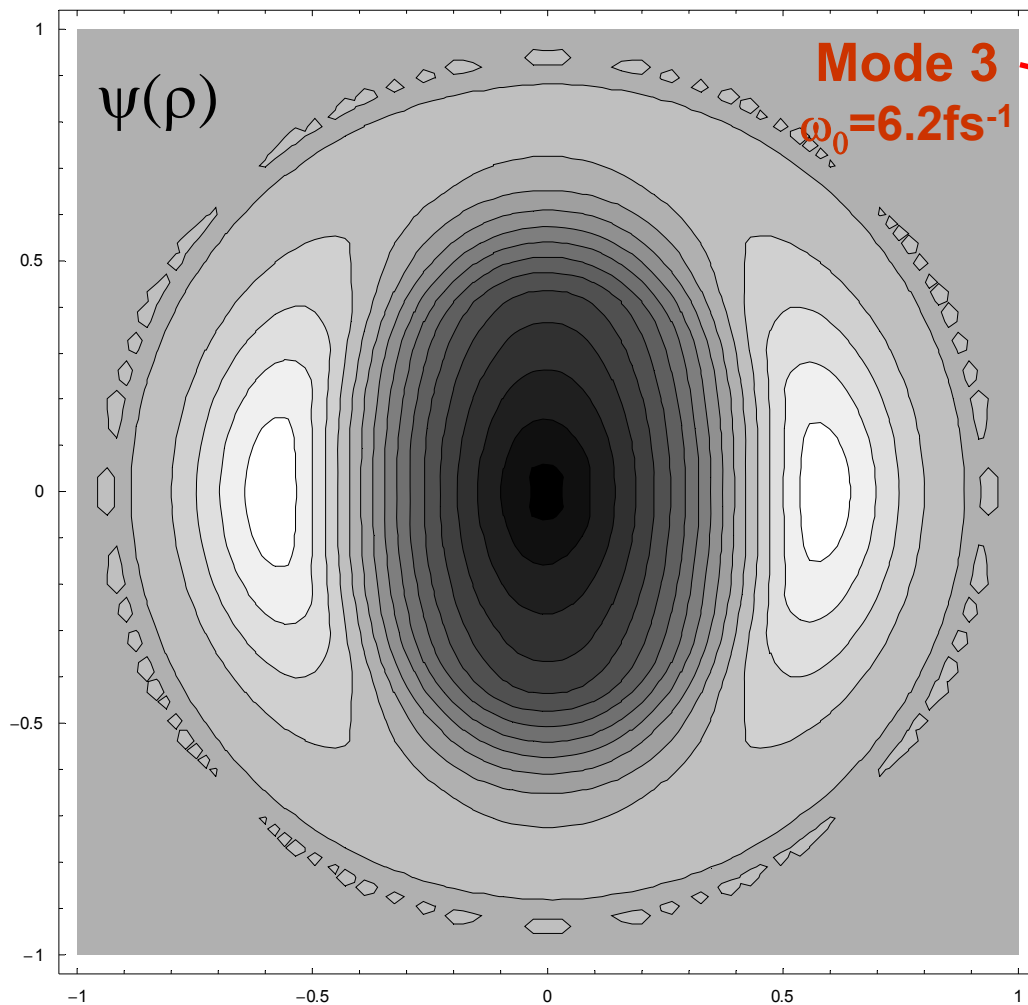
# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды



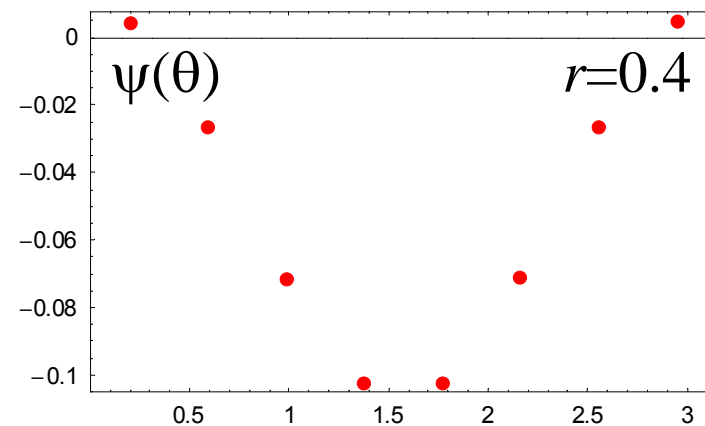
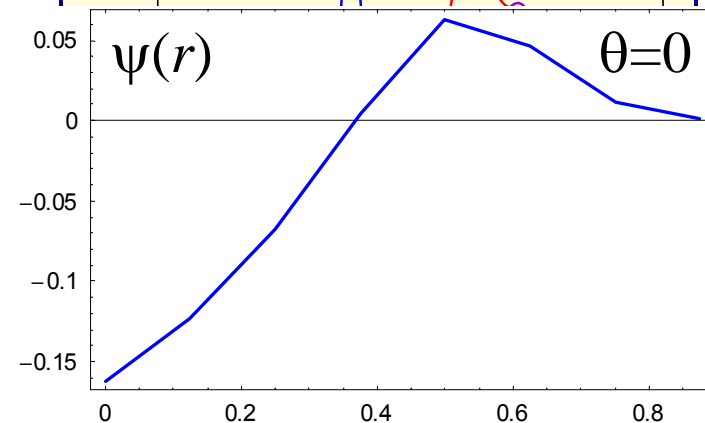
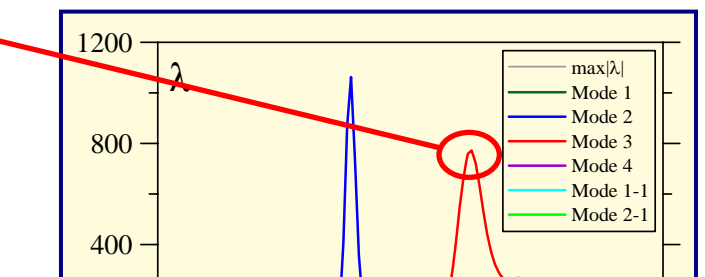
Распределения однородны по  $\varphi$   
и усреднены по  $0 < \varphi < 2\pi$



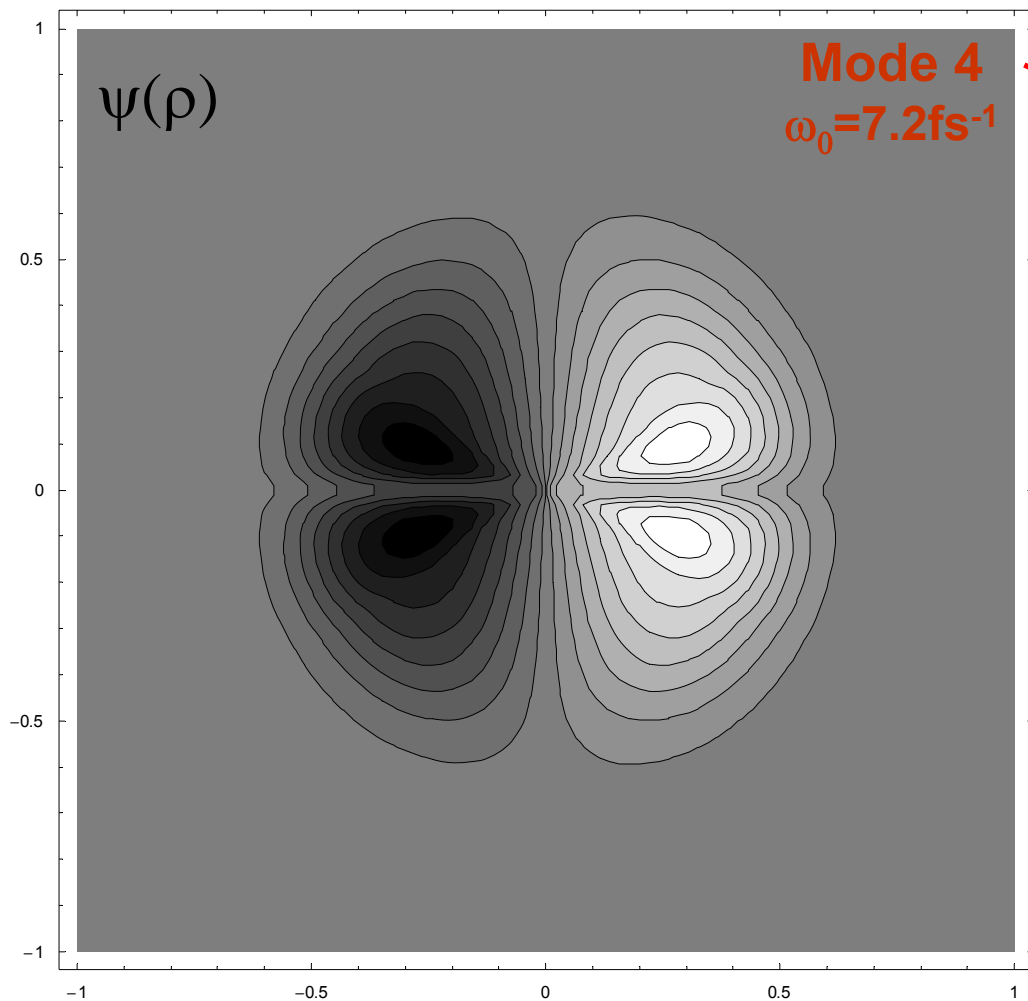
# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды



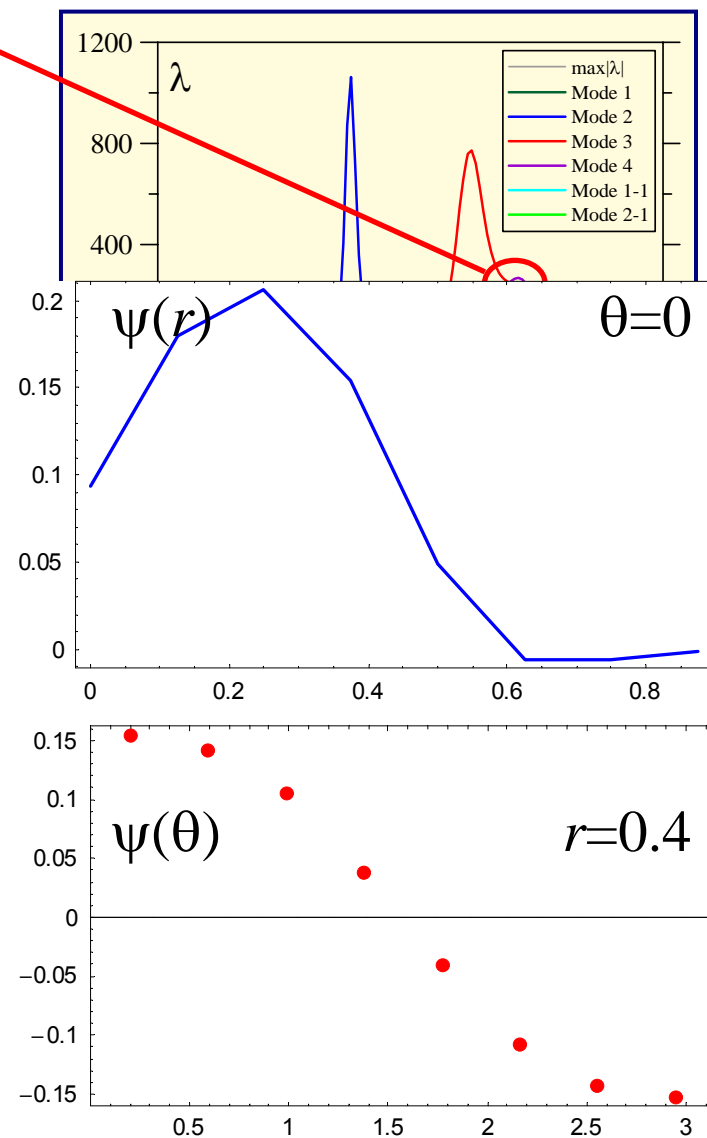
Распределения однородны по  $\varphi$   
и усреднены по  $0 < \varphi < 2\pi$



# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды

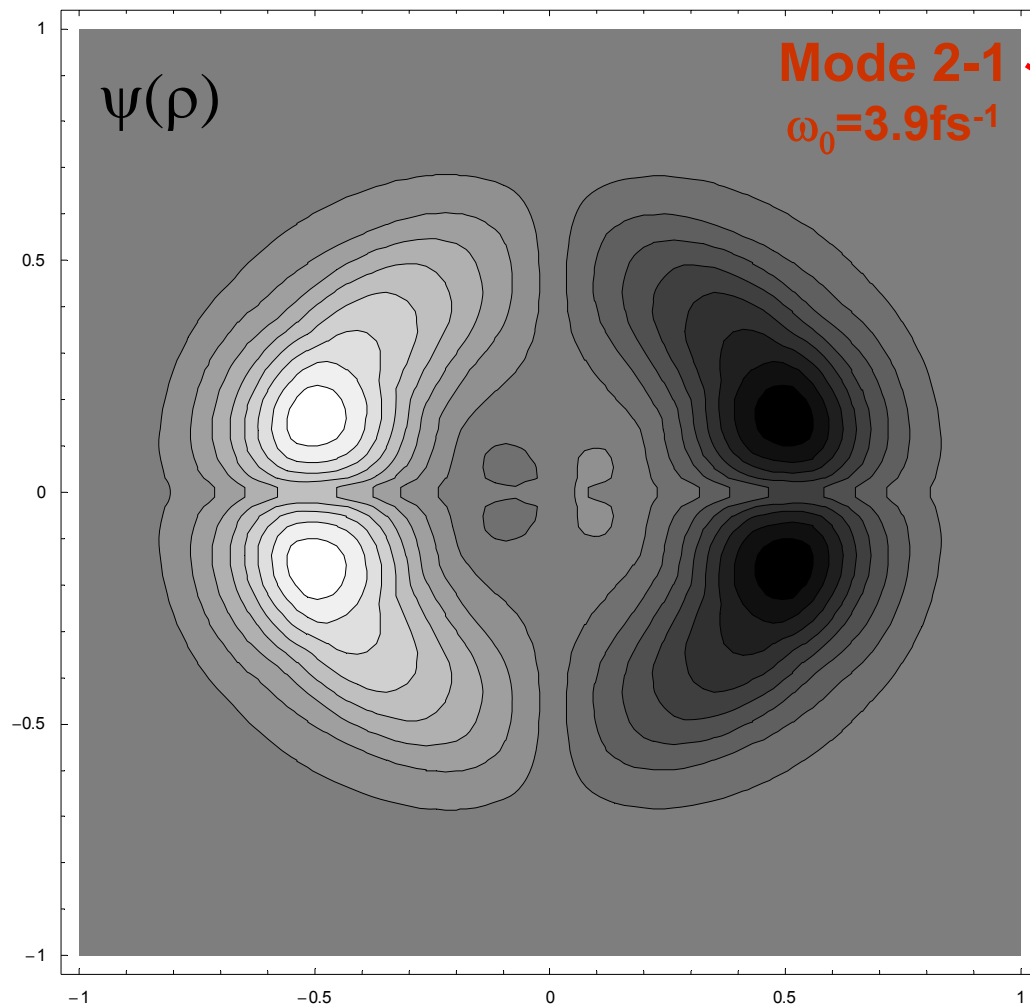


Распределения однородны по  $\varphi$   
и усреднены по  $0 < \varphi < 2\pi$

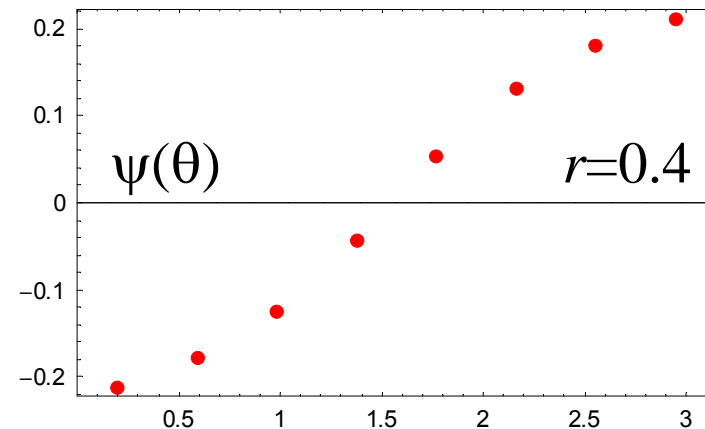
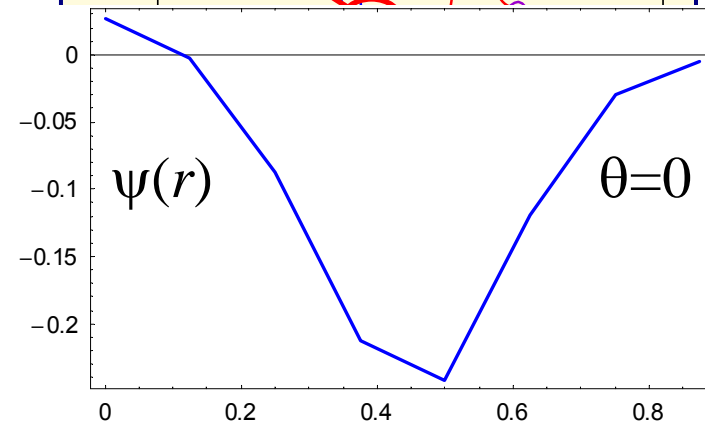
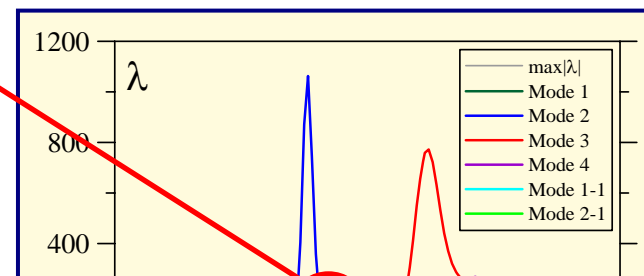




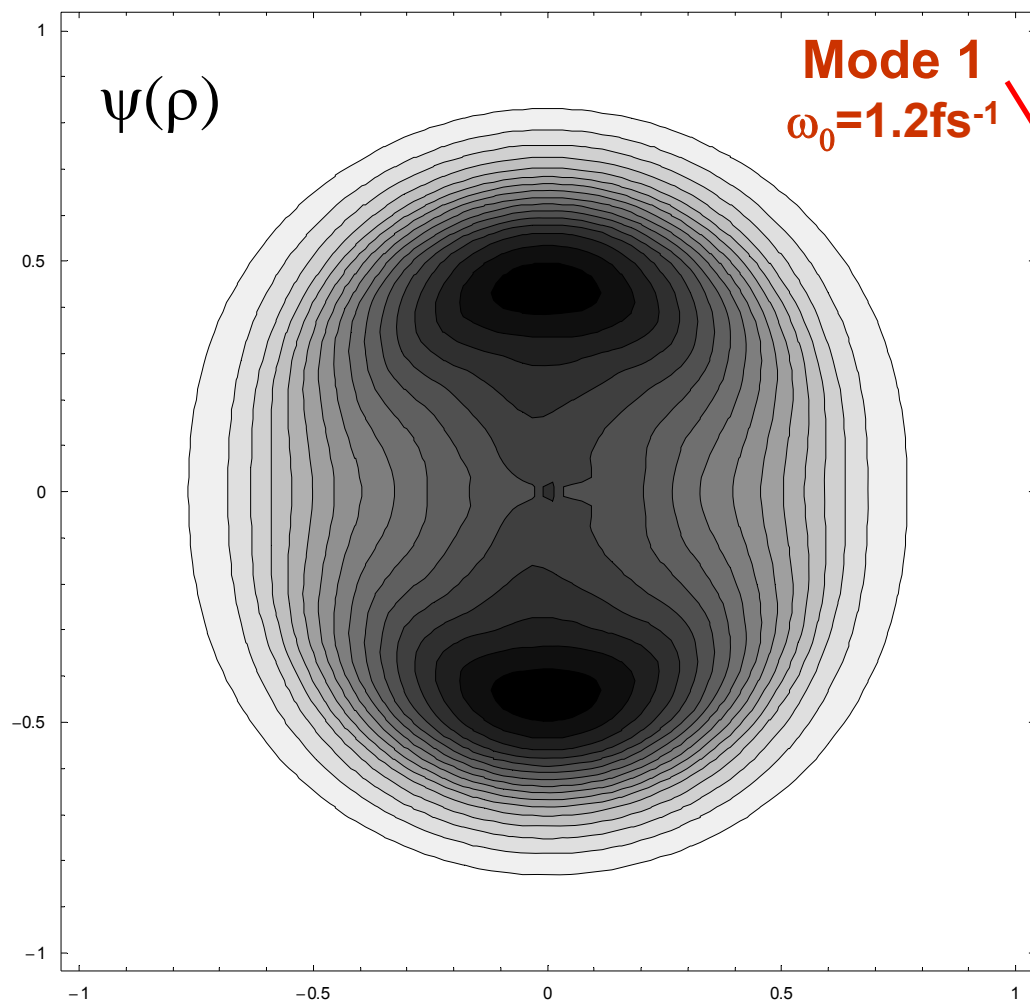
# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды



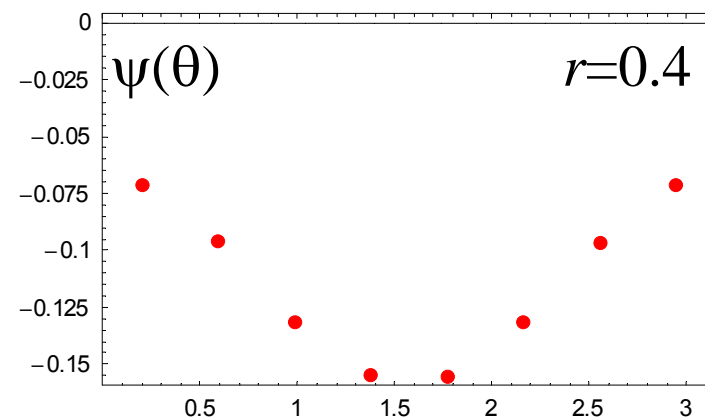
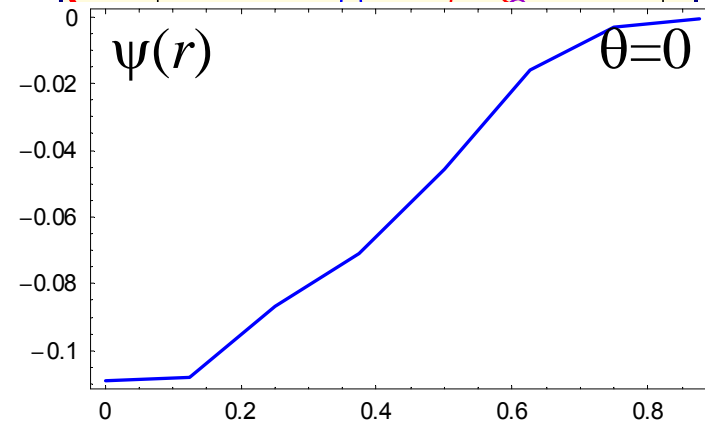
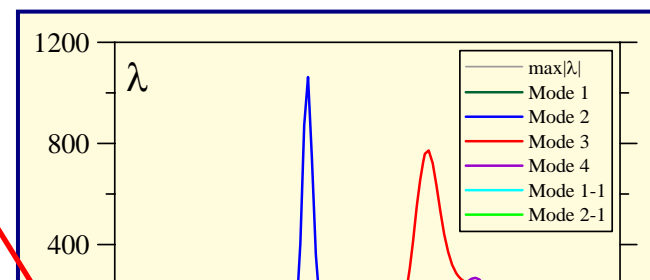
Распределения однородны по  $\varphi$   
и усреднены по  $0 < \varphi < 2\pi$



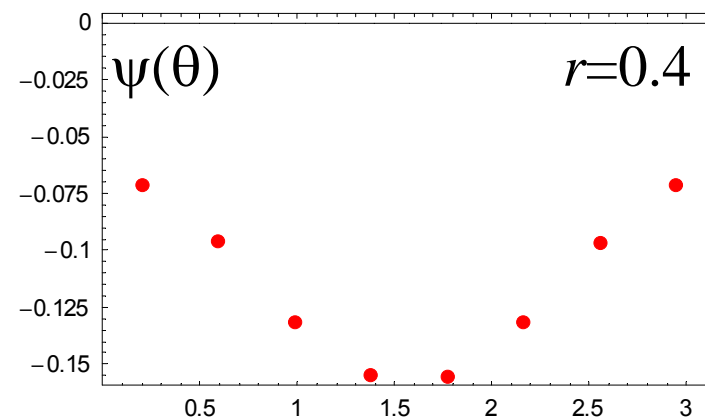
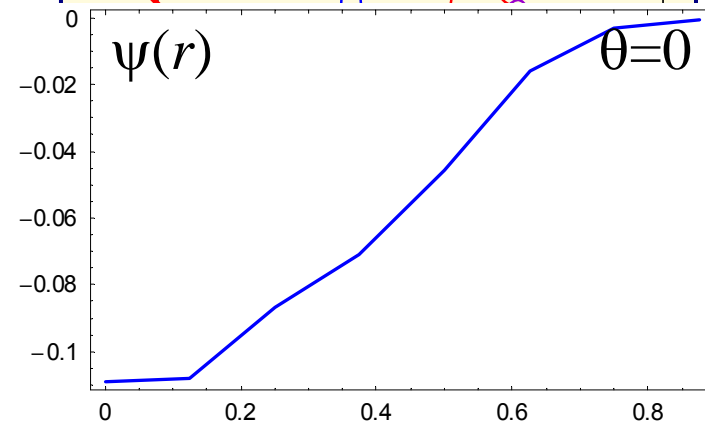
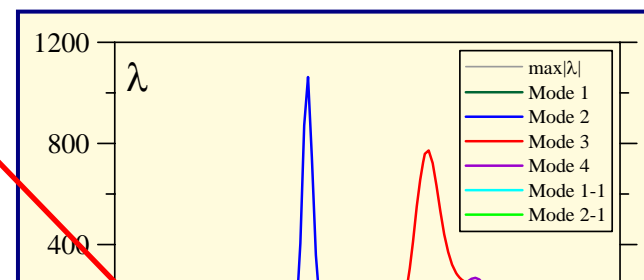
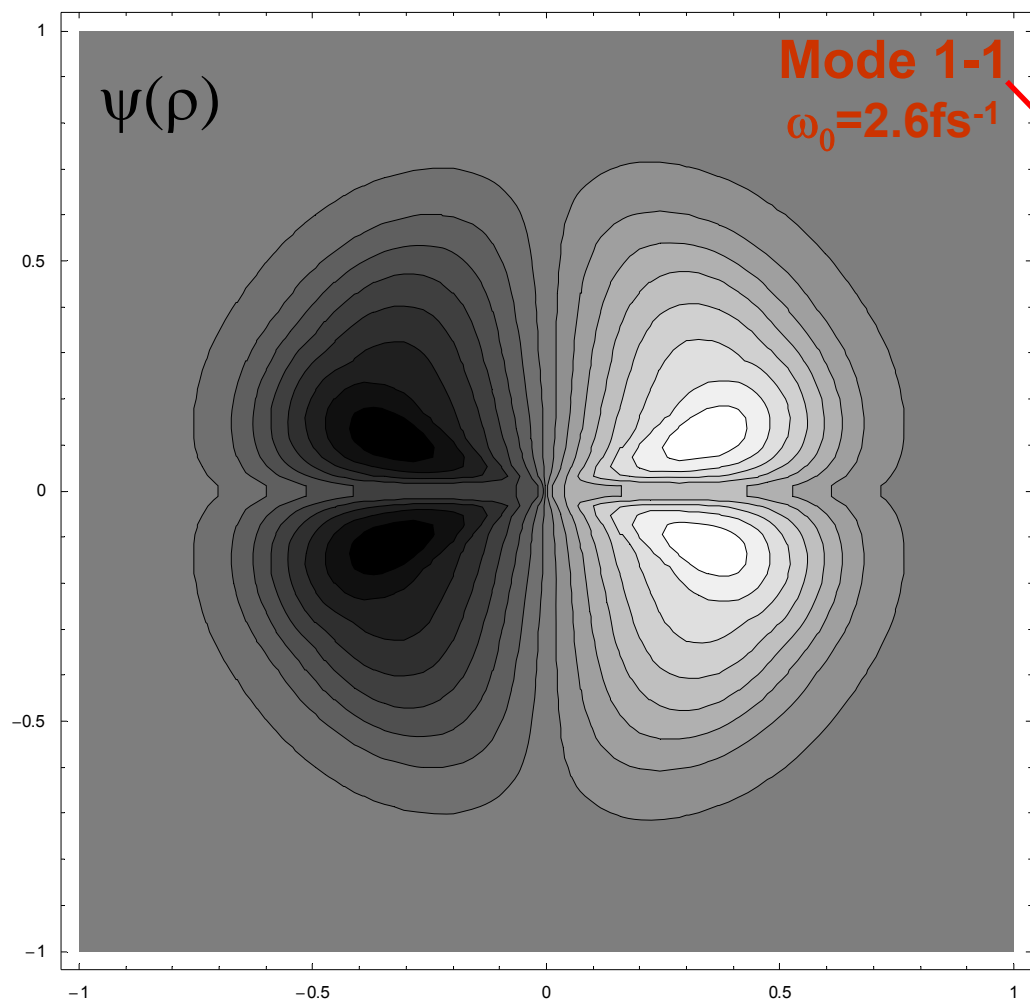
# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды



Распределения однородны по  $\varphi$   
и усреднены по  $0 < \varphi < 2\pi$

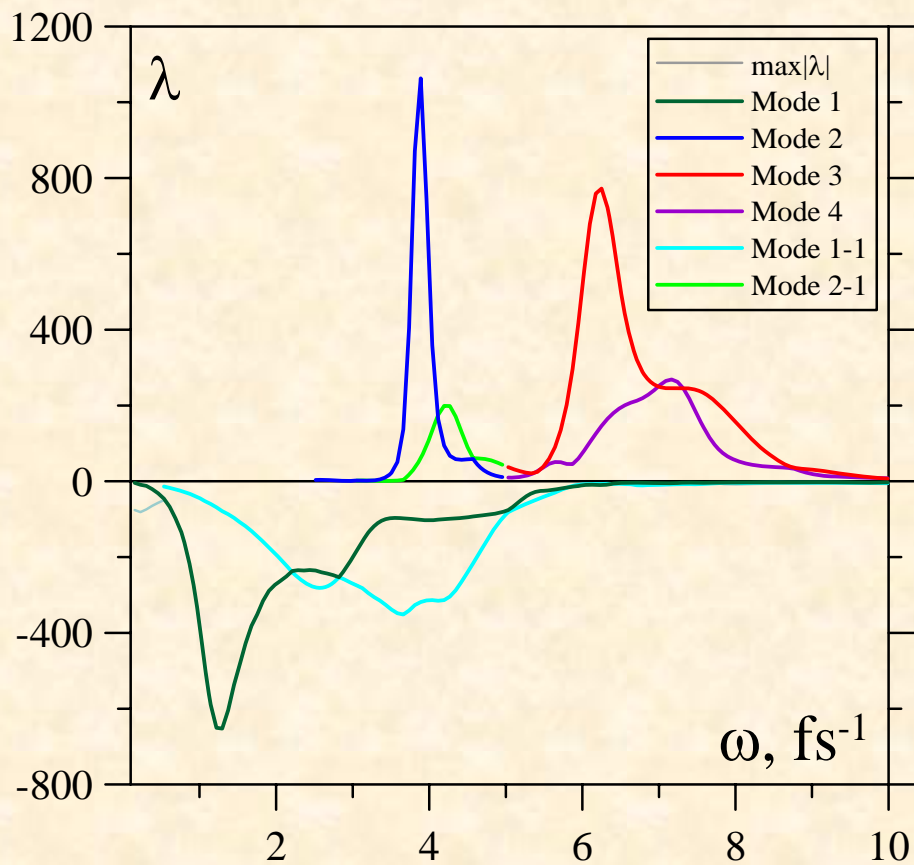


# Пространственное распределение амплитуды колебаний для отдельной моды



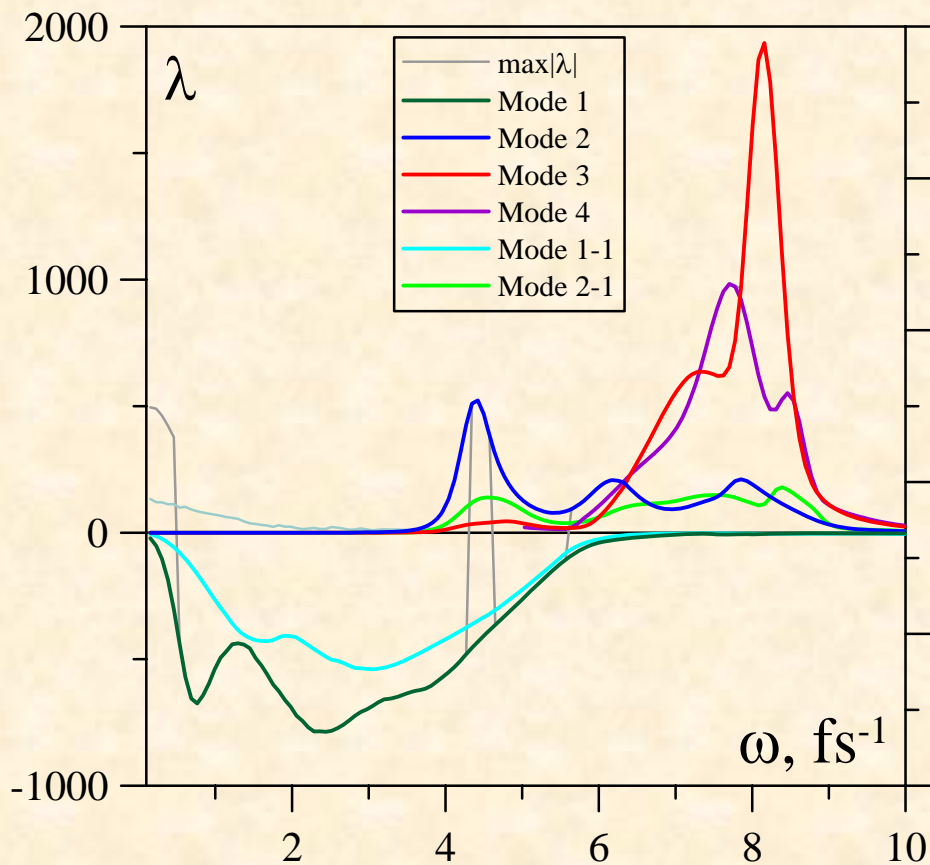
Распределения однородны по  $\phi$   
и усреднены по  $0 < \phi < 2\pi$

# Зависимость амплитуды моды от частоты



$\text{Na}_{55}$

$Z=12, T_e = 1\text{eV}, n_e = 17 \cdot 10^{21}\text{cm}^{-3}$



$\text{Na}_{309}$

$Z=16, T_e = 1\text{eV}, n_e = 17 \cdot 10^{21}\text{cm}^{-3}$

# Выводы

1. Эксперименты с кластерами предоставляют возможность проверки теории неидеальной плазмы.
2. Для изучения свойств плазмы в настоящей работе использовано усреднение по равновесной МД траектории с принудительной остановкой ионов. Следующим шагом будет усреднение по ансамблю неравновесных состояний.
3. На Фурье преобразовании автокоррелятора тока присутствует несколько пиков, соответствующих коллективным колебаниям электронов, что отличается от случая пространственно однородной плазмы.
4. В работе проанализированы основные моды колебаний электронного облака, найдены их частоты и относительные амплитуды.