

Моделирование неидеальной плазмы методом молекулярной динамики с расщепленными волновыми пакетами

Морозов И.В., Валуев И.А.

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

Метод классической молекулярной динамики (МД) широко применяется для моделирования равновесной и неравновесной неидеальной плазмы [1,2]. В то же время применение МД ограничено областью невырожденной и полностью ионизованной плазмы. Зачастую такая модель является слишком грубой для описания реальных экспериментальных условий. Одна из возможностей улучшить метод МД, не потеряв его эффективности, состоит в том, чтобы рассматривать электроны в виде волновых пакетов [3]. В этом случае отпадает проблема выбора псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия, улучшается точность моделирования элементарных актов соударений частиц, процессов ионизации и рекомбинации. При использовании антисимметризованных волновых пакетов добавляется учет обменного взаимодействия в рамках приближения Хартри-Фока [4]. Данный метод получил название молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП, WPMD).

Недостатками существующих реализация метода МДВП является низкая точность описания связанных состояний электрона и иона, а также расплывание волновых пакетов для свободных электронов [5]. Обе эти проблемы предлагается решать на основе нового подхода, использующего базис из нескольких гауссовских волновых пакетов для волновой функции каждого электрона. Как показали расчеты, этот подход позволяет воспроизвести энергии основного состояния водорода и гелия с точностью не хуже 1% всего для трех гауссовских пакетов на электрон. Существенным преимуществом является также возможность моделировать квантовые эффекты, связанные с расщеплением волновой функции, например, прохождение через потенциальный барьер. В качестве примера в работе рассмотрена задача туннельной ионизации атома водорода в поле фемтосекундного лазерного импульса. Результаты, полученные новым методом, хорошо совпадают с квантово-механическими расчетами.

В дальнейшем планируется применить разработанный метод для моделирования связанных состояний электронов и ионов в неидеальной плазме, совместив его с классической моделью кулоновского взаимодействия для свободных электронов.

1. И.В. Морозов, Г.Э. Норман // ЖЭТФ **127**, 412 (2005).
2. T. Raitza, H. Reinholz, G. Röpke, I. Morozov, and E. Suraud, *Contrib. Plasma Phys.* **49**, 496 (2009).
3. D. Klakow, C. Toepffer, P. G. Reinhard, *J. Chem. Phys.* **101**, 10766 (1994).
4. B. Jakob, P. G. Reinhard, C. Toepffer, G. Zwicknagel, *J. Phys. A* **42**, 214055 (2009).
5. I.V. Morozov, I. A. Valuev, *J. Phys. A* **42**, 214044 (2009).