

# МЕТОД ПСЕВДОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗКОСТИ И ИОННОЙ САМОДИФФУЗИИ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ

А. Л. Фальков<sup>a\*</sup>, П. А. Лобода<sup>a,b\*\*</sup>, А. А. Овечкин<sup>a\*\*\*</sup>, С. В. Ивлиев<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Российский федеральный ядерный центр —  
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е. И. Забабахина  
456770, Снежинск, Челябинская обл., Россия

<sup>b</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
115409, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 ноября 2021 г.,  
после переработки 29 ноября 2021 г.  
Принята к публикации 29 ноября 2021 г.

С помощью квазиклассического варианта метода псевдоатомной молекулярной динамики выполнены расчеты коэффициентов динамической вязкости и ионной самодиффузии теплой и умеренно нагретой плотной плазмы ряда химических элементов, представляющие интерес для исследований по физике высоких плотностей энергии, решения ряда прикладных геофизических и планетологических задач, а также для сравнения с расчетными данными других авторов. Учтены эффекты, обусловленные кулоновским взаимодействием в среде, а также квантовыми свойствами электронной подсистемы плазмы. Предложены соответствующие аналитические аппроксимации для коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии, которые могут быть использованы для моделирования динамики плотного ионизованного вещества при описании экспериментов по физике высоких плотностей энергии.

DOI: 10.31857/S0044451022030130

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Во многих задачах физики высоких плотностей энергии реализуются квазиравновесные состояния вещества с плотностью порядка твердотельной и температурой, недостаточно высокой для его полной ионизации, — так называемое теплое,  $T \sim E_F$  ( $E_F \sim 10$  эВ — энергия Ферми), или умеренно нагретое,  $T \lesssim 0.3\text{--}1$  кэВ, плотное ионизованное вещество. Поскольку экспериментальные данные по теплофизическим свойствам такого вещества весьма ограничены и часто имеют значительную погрешность, большое значение имеет разработка соответствующих теоретических методов, не использующих эмпирическую информацию и применимых в указанной области параметров вещества. Теплое и умеренно нагретое плотное вещество, как правило, характери-

зуется частичным вырождением электронной подсистемы, а также сопоставимыми значениями кинетической и потенциальной энергий взаимодействия частиц. Поэтому для описания свойств такого вещества методы расчета, разработанные для слабонеидеальной плазмы и твердого тела, часто оказываются неприменимыми.

На практике при относительно невысоких температурах,  $T \lesssim E_F$ , и плотностях меньше или порядка нескольких значений плотности твердого тела наиболее точные результаты дает *ab initio*-метод квантовой молекулярной динамики (КМД) [1]. Однако этот метод имеет свои ограничения: сильный рост вычислительных затрат при  $T \gtrsim E_F$ , невозможность описания взаимодействия частиц с помощью псевдопотенциалов при высоких плотностях и температурах, когда ионные остовы перекрываются или происходит тепловое возбуждение внутренних электронов. Поэтому расчеты методом КМД требуются дополнять результатами других моделей, области применимости которых пересекались бы с диапазоном температур и плотностей, практически до-

\* E-mail: sinarit9091@mail.ru

\*\* E-mail: p.a.loboda@vniitf.ru

\*\*\* E-mail: ovechkin.an@mail.ru

ступным для КМД. Среди таких моделей выделяются модели среднего атома (см., например, [2–6]), которые являются существенно более экономичными по сравнению с методом КМД, что достигается путем сведения задачи к одноцентровой и сферически-симметричной.

Такой подход вполне эффективен при описании термодинамических свойств вещества, однако он не позволяет вычислять ионные переносные характеристики — коэффициенты самодиффузии и вязкости. Отметим также, что существует промежуточный диапазон параметров плазмы, в котором, с одной стороны, температуры и плотности достаточно высоки, чтобы сделать расчеты методом КМД затруднительными, но, с другой стороны, степень неидеальности плазмы достаточно велика, что не позволяет пренебречь ионными корреляциями и воспользоваться оценками для коэффициентов переноса, следующими из кинетической теории газов [7, 8]. Поэтому желательно иметь метод, который позволял бы проводить расчеты при более высоких температурах по сравнению с КМД, при этом учитывал бы сильные межчастичные корреляции в плотном ионизованном веществе и был бы свободен от ограничений, характерных для моделей среднего атома. В принципе, таким условиям отвечает вариант метода КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (так называемая безорбитальная молекулярная динамика — *orbital-free molecular dynamics*, OFMD, или томас-фермиевская молекулярная динамика — *Thomas-Fermi molecular dynamics*, TFMD) [9–13], однако эти подходы все равно остаются достаточно затратными.

В настоящей работе рассмотрен квазиклассический вариант [14, 15] другого перспективного метода — метода псевдоатомной молекулярной динамики (ПАМД) [16–18], — представляющий собой комбинацию метода классической молекулярной динамики (МД) [19–21] для ионов и теоретической модели Старретта и Саумона [22–24] в квазиклассическом приближении для описания ионных корреляций и расчета эффективных парных потенциалов взаимодействия ионов. С помощью данного варианта метода ПАМД получены зависимости коэффициентов динамической вязкости  $\eta(\rho, T)$  и самодиффузии  $D(\rho, T)$  от плотности  $\rho$  и температуры  $T$  для плотной плазмы ряда химических элементов, представляющих интерес для моделирования динамики плотного ионизованного вещества в исследованиях по физике высоких плотностей энергии [25, 26], при решении ряда задач планетологии и геофизики [27–34], а также для сравнения с расчетными дан-

ными других авторов [35–38]. Краткое описание метода ПАМД и способы расчета ионных переносных коэффициентов рассматриваются в разд. 2. Результаты расчетов коэффициентов динамической вязкости и самодиффузии приведены в разд. 3. В разд. 4 проведено обсуждение результатов расчетов.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА

Теоретическая модель Старретта и Саумона [22–24] представляет собой обобщение модели среднего атома, в рамках которого удалось достичь самосогласованного описания микроструктуры вещества (с учетом ион-ионных и ион-электронных корреляций) и потенциальной энергии парного взаимодействия в электрон-ионной плазме. Модель позволяет с высокой степенью физической достоверности описать как результаты ряда рентгеноструктурных экспериментов по томсоновскому рассеянию монохроматического излучения на плотной плазме [25, 26], так и данные, полученные в ходе математического моделирования с использованием различных вариантов методов МД и Монте-Карло [23, 39, 40]. При этом расчет статической микроструктуры вещества по модели Старретта и Саумона оказывается существенно менее затратным по сравнению с указанными методами.

В модели Старретта и Саумона ядра атомов, рассматриваемые совместно с центрально-симметричными облаками связанных и экранирующих свободных электронов с плотностями соответственно  $n_{e,b}(r)$  и  $n_e^{scr}(r)$ , образуют псевдоатомы (ПА), электрически нейтральные на бесконечности<sup>1)</sup>:

$$Z = \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{PA}(r), \quad (1)$$

где  $Z$  — заряд ядра, а величина

$$n_e^{PA}(r) = n_{e,b}(r) + n_e^{scr}(r) \quad (2)$$

определяет плотность электронов псевдоатома. При этом движение псевдоатома описывается законами классической механики.

Экранирующая электронная плотность  $n_e^{scr}(r)$ , определяющая вид межйонного потенциала, в модели Старретта и Саумона [22, 23] находится как разность плотностей свободных электронов в полной модели среднего атома и в модели среднего атома

<sup>1)</sup> В разд. 2 используется атомная система единиц ( $e = \hbar = m_e = 1$ ).

с той же ион-ионной парной корреляционной функцией  $g_{II}(r)$  и тем же химическим потенциалом электронов  $\mu_e$ , но с искусственно удаленным центральным ядром:

$$n_e^{scr}(r) = n_e(r) - n_{e,f}^{ext}(r) - n_{e,b}(r), \quad (3)$$

где  $n_e(r)$  — суммарная электронная плотность в полной модели среднего атома,  $n_{e,f}^{ext}(r)$  — плотность свободных электронов.

Эффективную потенциальную энергию  $V(r)$  парного взаимодействия между ионами в рамках модели Старретта и Саумона удобно вычислять с помощью обратного трехмерного интегрального преобразования Фурье<sup>2)</sup> от разности фурье-образов незранированной кулоновской энергии взаимодействия ионов и свертки экранирующей электронной плотности  $n_e^{scr}(r)$  с прямой ион-электронной парной корреляционной функцией  $c_{Ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ , что дает в результате [23]:

$$V(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{+\infty} dk k V(k) \sin(kr), \quad (4)$$

$$\beta V(k) = \frac{4\pi\beta}{k^2} Z_*^2 - n_e^{scr}(k) c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0).$$

Здесь  $\beta = 1/T$ ,  $\bar{n}_e^0 = Z_* n_I^0$  — средняя плотность свободных электронов,  $n_I^0 = \rho N_A a_0^3 / A$  — асимптотическая плотность ионов (ат. ед.),  $\rho$  — плотность вещества ( $\text{г}/\text{см}^3$ ),  $a_0$  — боровский радиус,  $N_A$  — число Авогадро,  $A$  — атомный вес ( $\text{г}/\text{моль}$ ). Величина  $Z_*$  — средний заряд иона в картине псевдоатома — определена выражением

$$Z_* = Z - \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_{e,b}(r) = \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{scr}(r). \quad (5)$$

Фурье-образ прямой электрон-электронной парной корреляционной функции  $c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0)$  из (4) определен в [23] через фурье-образы экранирующей электронной плотности  $n_e^{scr}(k)$  и эффективной восприимчивости электронного газа  $\chi_e(k)$ :

$$c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0) = -\beta n_e^{scr}(k) / \chi_e(k). \quad (6)$$

Для восприимчивости электронного газа  $\chi_e(k)$  используется приближение [41], состоящее в учете корреляционных эффектов в электронном газе на основании моделирования методом Монте-Карло [42].

<sup>2)</sup> В рассматриваемом нами сферически-симметричном случае трехмерное интегральное преобразование Фурье сводится к синус-преобразованию Фурье, но над функцией, которая умножена на  $4\pi r/k$  при прямом преобразовании и на  $k/(\pi r)$  — при обратном, где  $r$  — радиальная координата, а  $k$  — волновое число.

В рамках квазиклассического подхода (см., например, [2]) полная электронная плотность  $n_e(r)$  может быть определена в результате решения системы уравнений для «бесконечного среднего атома» [24], заряд ядра которого равен  $Z$ :

$$n_e(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2} \left( \beta \left( \mu_e - V_{Ne}^{eff}(r) \right) \right),$$

$$I_{1/2}(x) = \int_0^{+\infty} \frac{dy \sqrt{y}}{1 + \exp(y - x)}, \quad (7)$$

$$V_{Ne}^{eff}(r) = -\frac{Z}{r} + \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_e(r') - \langle Z \rangle n_I^0 g_{II}^{(0)}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \left( \frac{3n_e(r)}{\pi} \right)^{1/3} + \left( \frac{3n_e^0}{\pi} \right)^{1/3}.$$

Здесь  $n_e^0 = \lim_{r \rightarrow \infty} n_e(r)$  при  $r \rightarrow \infty$  — асимптотическая плотность электронов;  $V_{Ne}^{eff}(r)$  — эффективная потенциальная энергия электрона в поле ядра, других электронов и внешних ионов с зарядами

$$\langle Z \rangle = \frac{n_e^0}{n_I^0} = \frac{\sqrt{2}}{n_I^0 \pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2}(\beta \mu_e). \quad (8)$$

Плотность свободных электронов  $n_{e,f}^{ext}(r)$  можно найти при решении задачи, аналогичной (7), положив заряд ядра равным нулю ( $Z \equiv 0$ ):

$$n_{e,f}^{ext}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2} \left( \beta \left( \mu_e - V_e^{eff,ext}(r) \right) \right),$$

$$V_e^{eff,ext}(r) = \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_{e,f}^{ext}(r') - \langle Z \rangle n_I^0 g_{II}^{(0)}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \left( \frac{3n_{e,f}^{ext}(r)}{\pi} \right)^{1/3} + \left( \frac{3n_e^0}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (9)$$

В уравнениях (7) и (9) химический потенциал электронного газа  $\mu_e$  определяется по модели Томаса–Ферми–Дирака, а ион-ионная парная корреляционная функция (радиальная функция распределения — РФР)  $g_{II}(r)$  взята в нулевом приближении модели Старретта и Саумона относительно учета межйонных взаимодействий:

$$g_{II}^{(0)}(r) = \theta(r - r_0^I),$$

где  $\theta(x)$  — функция Хевисайда,  $r_0^I = \sqrt[3]{3/(4\pi n_I^0)}$  — радиус сферической атомной ячейки<sup>3)</sup>. Решение системы уравнений (7), полученное с функцией нулевого приближения  $g_{II}^{(0)}(r)$ , отвечает модели Томаса–Ферми–Дирака с учетом обменного взаимодействия электронов в локальном приближении [2].

Решение систем уравнений (7) и (9) позволяет найти экранирующую электронную плотность (3) и эффективную энергию межйонного взаимодействия (4), если известен вклад связанных электронов  $n_{e,b}(r)$ . Для описания этого вклада в данной работе используется приближение [45], состоящее в том, что связанными считаются только электроны с отрицательной энергией, локализованные в объеме сферической атомной ячейки:

$$n_{e,b}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} \left\{ I_{1/2} \left[ \beta \left( \mu_e - V_{N_e}^{eff}(r) \right) \right] - J_{1/2} \left[ \beta \left( \mu_e - V_{N_e}^{eff}(r) \right), -\beta V_{N_e}^{eff}(r) \right] \right\} f_{cut}(r). \quad (10)$$

В формулу (10) входит  $J_k(x, a)$  — неполный интеграл Ферми–Дирака [2], и гладкая функция  $f_{cut}(r)$  [23], аппроксимирующая ступенчатую функцию Хевисайда  $\theta(r - r_0^I)$ :

$$J_k(x, a) = \int_a^{+\infty} \frac{dy y^k}{1 + \exp(y - x)}, \quad (11)$$

$$f_{cut}(r) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - r_0^I}{cr_0^I}\right) \right]^{-1}, \quad c = \frac{1}{20}.$$

Для численного решения систем уравнений (7) и (9) применялся метод Пуассона–Гельмгольца [46]. При выполнении синус-преобразований Фурье использовался метод интегрирования быстроосциллирующих функций [47, 48].

Полученные функции  $V(r)$  использовались при МД-моделировании системы, состоящей из  $N_{tot} = 343$  частиц. В начальный момент времени ионы

хаотически распределялись внутри расчетной области с периодическими граничными условиями с сохранением средней плотности вещества. Интегрирование уравнений, описывающих движение ионов, осуществлялось с помощью двухслойной по времени численной схемы [21]. Флуктуации температуры системы контролировались с помощью алгоритма с отрицательной обратной связью [21], который позволяет корректировать ускорения частиц на каждом шаге расчета по времени. При проведении моделирования считалось, что система находится в локальном термодинамическом равновесии с одинаковыми значениями температуры ионов и электронов. Шаг расчета по времени составлял  $\Delta t = 0.2$ – $0.7$  фс. В ходе расчета проводилось до 0.5 млн шагов, причем в ходе первых 25 тыс. шагов устанавливалась необходимая температура ионной подсистемы вещества, а затем происходило накопление статистической информации о динамике системы.

Коэффициент самодиффузии ионов вещества  $D(\rho, T)$  рассчитывался двумя способами. В приближении Эйнштейна–Смолуховского указанная величина может быть определена как [49]

$$D_r = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6N_{tot}t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_{tot}} |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \right\rangle, \quad (12)$$

где  $\{\mathbf{r}_i(t)\}_{i=1}^{N_{tot}}$  — совокупность радиус-векторов частиц в некоторый ненулевой момент времени  $t$ ,  $\{\mathbf{r}_i(0)\}_{i=1}^{N_{tot}}$  — набор радиус-векторов в начальный момент времени. Выразив в (12) средний квадрат смещения частицы за время  $t$  через интегралы от ее скорости, можно получить формулу Кубо–Грина [49], которая связывает автокорреляционную функцию (АКФ) скорости  $\mathbf{v}_i(t)\mathbf{v}_i(0)$  с коэффициентом ионной самодиффузии:

$$D_v = \frac{1}{3N_{tot}} \int_0^{+\infty} dt \sum_{i=1}^{N_{tot}} \langle \mathbf{v}_i(t)\mathbf{v}_i(0) \rangle, \quad (13)$$

где  $\{\mathbf{v}_i(t)\}_{i=1}^{N_{tot}}$  и  $\{\mathbf{v}_i(0)\}_{i=1}^{N_{tot}}$  — наборы скоростей частиц соответственно в некоторый момент времени  $t$  и в начальный момент времени. Проведенные нами расчеты показывают, что значения  $D_r$  и  $D_v$ , определенные для некоторого состояния плотной плазмы, обычно отличаются друг от друга не более чем на 10%. Указанное различие обусловлено как счетной погрешностью, так и влиянием на величину  $D_r$  периодических граничных условий. По результатам расчетов коэффициентов ионной самодиффузии были построены аналитические аппроксимации значений  $D_{PAMD}(\rho, T) = (D_r + D_v)/2$ .

<sup>3)</sup> В [23, 24] показано, что замена РФР на ступенчатую функцию Хевисайда в уравнениях (7) и (9) не приводит к существенному изменению экранирующей электронной плотности. Поиск последующих приближений для РФР  $g_{II}(r) \neq g_{II}^{(0)}(r)$  может быть основан как на результатах ПАМД-моделирования ионной микроструктуры вещества, так и на решении системы уравнений Орнштейна–Цернике [43] для определения реалистических РФР  $g_{II}(r)$  [14, 15, 44]. Совместное итерационное уточнение РФР и экранирующей электронной плотности позволяет получить самосогласованное решение для модели Старретта и Саумона, которое в рамках метода ПАМД не имеет большого смысла, поскольку оказывается неоправданно затратным.

Для определения величины коэффициента динамической вязкости в настоящей работе используется формула Кубо–Грина, записанная через АКФ фурье-образа тензора вязких напряжений  $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$  ( $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ ) при  $\mathbf{k} = 0$  [49]:

$$\eta = \frac{1}{3TV} \int_0^{+\infty} dt \sum_{\alpha < \beta} \langle \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, 0) \rangle, \quad (14)$$

где символ  $\langle \sum_{\alpha < \beta} \dots \rangle$  означает суммирование АКФ недиагональных компонент тензора  $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$  по следующему правилу [21]:

$$\sum_{\alpha < \beta} \Pi_{\alpha\beta}(\dots) \Pi_{\alpha\beta}(\dots) \equiv \Pi_{xy}(\dots) \Pi_{xy}(\dots) + \Pi_{xz}(\dots) \Pi_{xz}(\dots) + \Pi_{yz}(\dots) \Pi_{yz}(\dots). \quad (15)$$

Выражение для фурье-образа  $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t)$  имеет вид [49]

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) = \sum_{i=1}^{N_{tot}} \left( m_{at} v_{i\alpha}(t) v_{i\beta}(t) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_{tot}} \frac{(r_{ij})_{\alpha} (r_{ij})_{\beta}}{r_{ij}} \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right). \quad (16)$$

Тензор (16) содержит кинетический (первое слагаемое суммы) и потенциальный вклады (второе слагаемое суммы). Кинетический вклад обусловлен поперечным переносом импульса в результате непосредственного (диффузионного) смещения ионов, потенциальный вклад связан с парными столкновениями частиц [49]. ПАМД-моделирование позволяет учесть эти вклады совместно.

Расчеты по формулам (12)–(14) проводились на основе ПАМД-моделирования движения системы частиц до некоторого момента времени  $t_{max}$ . Поэтому расчетные переносные коэффициенты  $D_r(t_*)$ ,  $D_v(t_*)$  и  $\eta(t_*)$  также оказываются зависящими от времени  $t_* \leq t_{max}$  (см. рис. 1). Величина  $t_*$  для каждого из рассматриваемых переносных коэффициентов выбиралась исходя из условий  $dD_r/dt|_{t_*} \approx 0$ ,  $dD_v/dt|_{t_*} \approx 0$  и  $d\eta/dt|_{t_*} \approx 0$ . При этом дальнейшее увеличение  $t_*$  зачастую приводит лишь к увеличению дисперсии переносных коэффициентов при сохранении их средних значений [33], поскольку при больших значениях  $t$  абсолютные величины АКФ близки к нулю и испытывают хаотические флуктуации.

Отметим, что при расчете величин коэффициентов переноса из (12), (13) и (14) используется алгоритм накопления данных [21, 50, 51], который

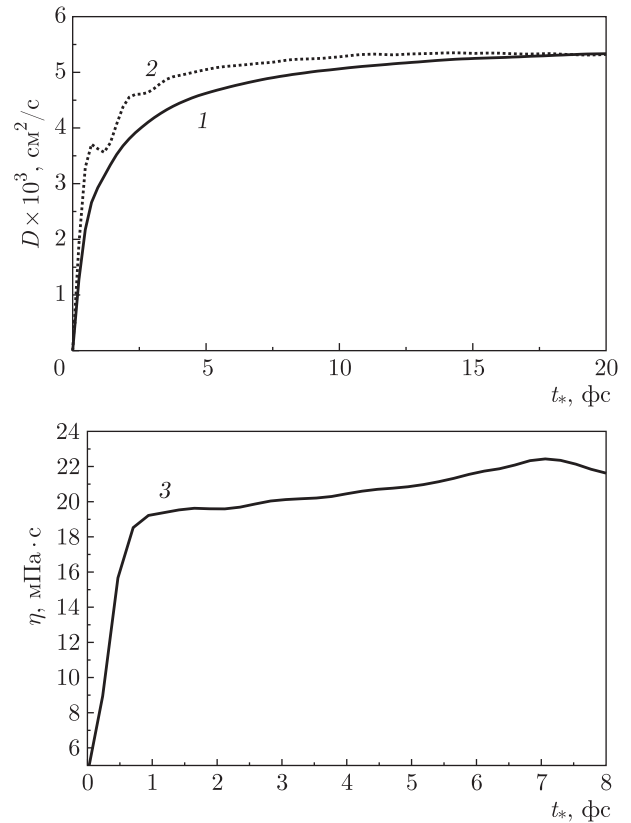


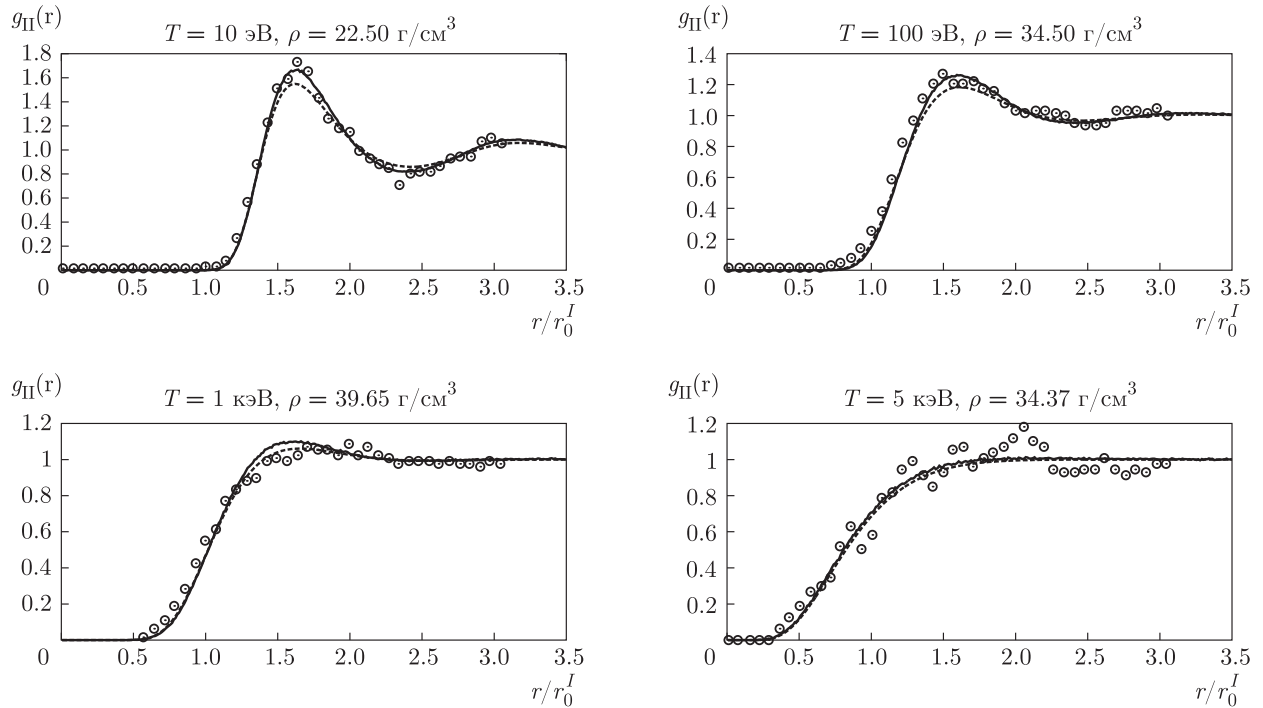
Рис. 1. Ионные переносные коэффициенты в зависимости от времени их накопления  $t_*$ : 1 —  $D_r$  (12), 2 —  $D_v$  (13), 3 —  $\eta$  (14). Плазма Fe при  $\rho = 34.5 \text{ г/см}^3$  и  $T = 100 \text{ эВ}$

позволяет существенно снизить величину дисперсии результатов моделирования. Для любых вариантов МД-моделирования далее по тексту указаны диапазоны статистической неопределенности результатов, которые соответствуют одному среднему квадратичному отклонению результатов моделирования от их общего выборочного среднего [51].

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

#### 3.1. Расчеты ион-ионных радиальных функций распределения

Полученные с помощью ПАМД-моделирования РФР  $g_{II}(r)$  были сопоставлены с результатами расчетов методом TFMD [9], а также по квазиклассическому варианту [14, 15] исходной версии модели Старретта и Саумона [22–24] с решением уравнений Орнштейна–Цернике с гиперцепным замыканием [43, 53] для РФР. На рис. 2 приведен пример РФР для состояний на ударной адиабате сплошного железа. Как видно на рисунке, все полученные



**Рис. 2.** Ион-ионные РФР для состояний на ударной адиабате сплошного железа, полученные методами ПАМД (сплошные кривые), TFMD (точки) [9], а также по квазиклассическому варианту [14, 15] исходной модели Старретта и Саумона [22–24] (штриховые кривые)

РФР хорошо согласуются между собой. Следовательно, можно считать, что потенциальная энергия  $V(r)$  (4) верно передает характер взаимодействия между ионами, а используемые в методике ПАМД алгоритмы расчета траекторий движения частиц и поддержания температуры системы не вносят дополнительных искажений в расчетную микроструктуру вещества.

### 3.2. Матричные аппроксимации для коэффициентов вязкости и самодиффузии ионов

Для проведения гидродинамического моделирования вместо таблиц расчетных данных по коэффициентам динамической вязкости и самодиффузии ионов оказывается удобным использовать аналитические аппроксимации этих данных в зависимости от логарифмов плотности и температуры вещества [52]<sup>4)</sup>:

$$\eta_{fit}(\rho, T) = \exp \left[ \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 b_{kl}^{(\eta)} \ln^{3-k} \rho \ln^{3-l} T \right], \quad (17)$$

$$D_{fit}(\rho, T) = \exp \left[ \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 b_{kl}^{(D)} \ln^{3-k} \rho \ln^{3-l} T \right], \quad (18)$$

где  $[\eta_{fit}] = \text{мПа} \cdot \text{с}$ ,  $[D_{fit}] = \text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $[\rho] = \text{г/см}^3$ ,  $[T] = \text{кэВ}$ . Матрицы коэффициентов аппроксимации  $\widehat{b}^{(\eta)}$  и  $\widehat{b}^{(D)}$  для указанных веществ, построенные на основании широкодиапазонных расчетов по методике ПАМД, приведены соответственно в (19)–(24) и (25)–(30):

$$\widehat{b}_{\text{Al}}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} -0.2047 & -0.7515 & -0.6338 \\ 0.1612 & 0.5425 & 6.358 \\ 1.015 & 10.24 & 28.75 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (19)$$

$$\widehat{b}_{\text{Fe}}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 0.6120 & 1.604 & 1.060 \\ -3.474 & -9.470 & 0.1817 \\ 5.320 & 20.25 & 29.22 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (20)$$

$$\widehat{b}_{\text{Cu}}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 0.1910 & 0.1748 & 0.1990 \\ -1.190 & -1.989 & 4.510 \\ 2.180 & 10.50 & 23.66 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (21)$$

<sup>4)</sup> Логарифмическая зависимость от аргументов позволяет применять (17) и (18) в задачах с сильной пространственной и/или временной неоднородностью полей  $\rho$  и  $T$ .

**Таблица 1.** Границы области определения аппроксимаций для коэффициентов динамической вязкости  $\eta_{fit}$  (17) и ионной самодиффузии  $D_{fit}$  (18). Наибольшие относительные погрешности аппроксимации

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	$\delta_{appr}^{max}(\eta), \%$	$\delta_{appr}^{max}(D), \%$
Al	$2.70 \leq \rho \leq 13.5$	$50 \leq T < 360$	14	5
Fe	$7.87 \leq \rho \leq 39.4$	$50 \leq T < 970$	14	6
Cu	$8.92 \leq \rho \leq 44.6$	$50 \leq T < 970$	9	10
Ag	$10.5 \leq \rho \leq 52.5$	$\eta: 50 \leq T < 1340$ $D: 50 \leq T < 970$	12	5
Au	$19.3 \leq \rho \leq 97.5$	$\eta: 50 \leq T < 2590$ $D: 50 \leq T < 970$	14	8
U	$18.9 \leq \rho \leq 94.7$	$50 \leq T < 970$	12	8

$$\widehat{b}_{Ag}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 0.3407 & 0.6919 & 0.6435 \\ -1.791 & -4.382 & 2.640 \\ 2.302 & 11.52 & 23.34 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (22)$$

$$\widehat{b}_U^{(D)} = \begin{pmatrix} -0.4950 & -0.5882 & -0.2008 \\ 3.081 & 4.237 & -3.513 \\ -4.826 & -3.098 & -31.92 \end{pmatrix} \times 10^{-1}. \quad (30)$$

$$\widehat{b}_{Au}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 1.804 & 0.6385 & 2.553 \\ -8.654 & -6.012 & 54.93 \\ 6.669 & 54.14 & 186.1 \end{pmatrix} \times 10^{-2}, \quad (23)$$

$$\widehat{b}_U^{(\eta)} = \begin{pmatrix} -0.1744 & -6.956 & -1.251 \\ 7.818 & 58.49 & 92.56 \\ -22.94 & -62.89 & 110.4 \end{pmatrix} \times 10^{-2}; \quad (24)$$

$$\widehat{b}_{Al}^{(D)} = \begin{pmatrix} -0.2917 & -0.7644 & -0.7044 \\ 0.4232 & 0.4672 & -3.921 \\ 0.6040 & 9.756 & -13.01 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (25)$$

$$\widehat{b}_{Fe}^{(D)} = \begin{pmatrix} -0.1141 & -8.543 & -0.2593 \cdot 10^{-2} \\ 0.2620 & 0.2513 & -4.292 \\ 0.2338 & 6.575 & -20.90 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (26)$$

$$\widehat{b}_{Cu}^{(D)} = \begin{pmatrix} 0.1500 & 0.7704 & 0.2325 \\ -1.328 & -4.930 & -5.928 \\ 2.585 & 14.10 & -19.08 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (27)$$

$$\widehat{b}_{Ag}^{(D)} = \begin{pmatrix} -0.3598 & -0.7198 & -0.3735 \\ 1.686 & 3.985 & -2.236 \\ -1.733 & 0.4782 & -28.61 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (28)$$

$$\widehat{b}_{Au}^{(D)} = \begin{pmatrix} -0.2685 & -0.1299 & -0.4043 \\ 1.339 & 0.7899 & -1.732 \\ -1.538 & 3.720 & -34.18 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (29)$$

Результаты ПАМД-моделирования приближены методом наименьших квадратов с достаточно высокой точностью, которая гарантируется внутри области определения выражений (17) и (18) (см. табл. 1). Так, относительная погрешность аппроксимации коэффициентов динамической вязкости ( $\delta_{appr}^{max}(\eta)$ ) и ионной самодиффузии ( $\delta_{appr}^{max}(D)$ ) для большинства рассчитанных точек сравнима по величине с относительной неопределенностью ПАМД-моделирования, принятой равной одному среднеквадратичному отклонению<sup>5)</sup>.

Область определения выражений для  $\eta_{fit}$  и  $D_{fit}$  с матрицами коэффициентов (19)–(30) достаточно широка: от нормальной плотности вещества до пятикратно сжатого состояния и от 50 эВ до температур 360–2600 эВ, при которых степень ионизации плазмы составляет  $Z_*/Z = 0.9\text{--}0.95$ .

Отметим также, что использование аппроксимаций (17) и (18) позволяет сгладить нерегулярные возмущения на зависимостях переносных коэффициентов от температуры и плотности, неизбежно возникающие при проведении статистического моделирования (см., например, рис. 4).

<sup>5)</sup> В наших расчетах по методике ПАМД наибольшая статистическая погрешность коэффициентов ионной самодиффузии относительно их средних значений не превышает 10 %, а для коэффициента вязкости — 15 %, что сравнимо с точностью расчетных результатов, полученных по методике КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD) [36, 37].

**Таблица 2.** Сравнение результатов расчетов коэффициента ионной самодиффузии  $D$  для плазмы Al, Fe, Cu и Ag по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (18) с данными моделирования методами OFMD и TFMD. В круглых скобках приведено относительное отличие результатов данной работы от значений, полученных методами OFMD и TFMD.  $D_{ПАМД} = (D_r + D_v)/2$ . Характерные статистические погрешности расчетов по методикам ПАМД и OFMD/TFMD не превышают 5–10 %

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	Коэффициент диффузии $D \cdot 10^3, \text{см}^2/\text{с}$			
			OFMD/TFMD	ПАМД		Формула (18)
Al	13.4	100	15 [38]	13.9	(-7 %)	14.0 (-7 %)
Fe	34.5	100	7 [35]	$D_v : 5.50 \pm 0.06$ $D_r : 5.52 \pm 0.06$	(-21 %) (-21 %)	5.4 (-23 %)
Cu	21.6	100	7.9 [38]	7.0	(-11 %)	6.8 (-14 %)
Ag	20.0	50	4.0 [37]	3.7	(-8 %)	3.8 (-5 %)
	20.0	100	6.0 [37]	5.7	(-6 %)	5.6 (-7 %)
	30.9	100	5.1 [38]	4.5	(-12 %)	4.2 (-18 %)
	20.0	200	9.0 [37]	8.4	(-7 %)	8.2 (-9 %)
	20.0	400	12.0 [37]	12.0	(0 %)	12.2 (+2 %)
	20.0	600	16.0 [37]	15.4	(-4 %)	15.5 (-3 %)

### 3.3. Результаты расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы Al, Fe, Cu и Ag

В табл. 2 приведены результаты расчетов коэффициента ионной самодиффузии в плазме Al, Fe, Cu и Ag, выполненных методами КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD и TFMD) [35, 37, 38] и ПАМД, а также по формуле (18) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (25)–(28). Рассматриваются случаи, когда температура вещества не превышает  $T = 600$  эВ, а сжатие плазмы относительно нормальной плотности  $\rho_0$  составляет  $\rho/\rho_0 = 2$ –5. Таким образом, в табл. 2 представлены состояния, отвечающие случаю плотной сильнонеидеальной плазмы. Действительно, средняя степень ионизации вещества  $Z_*/Z$  достигает 0.2–0.6, а отношение характерной энергии кулоновского взаимодействия между ионами к температуре вещества, т. е. ионный параметр неидеальности  $\Gamma_{II} = \beta Z_*^2 / r_0^I$ , где  $Z_*$  определяется согласно (5), принимает значения  $\Gamma_{II} \sim 10$ .

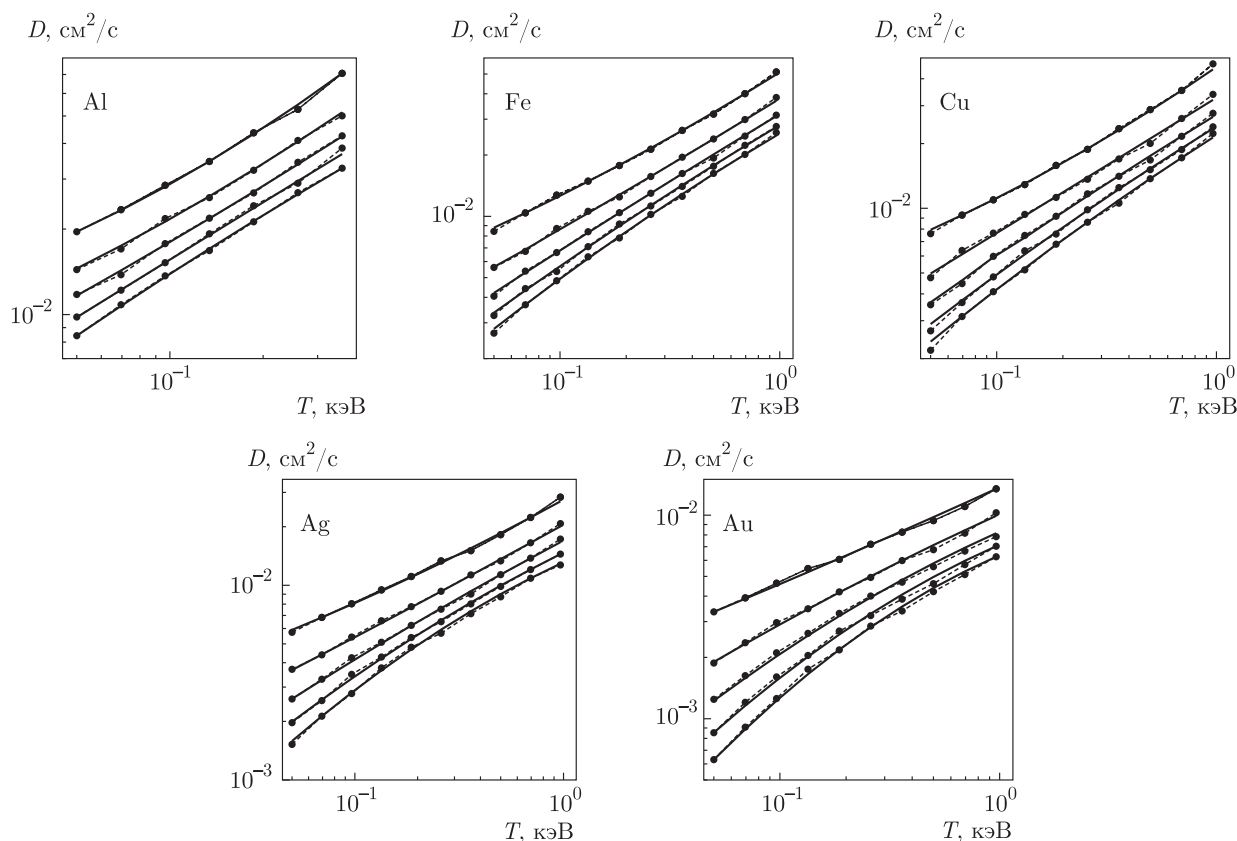
Из табл. 2 следует, что коэффициенты ионной самодиффузии, определенные непосредственно в ходе ПАМД-моделирования и рассчитанные по аппроксимирующей зависимости (18), достаточно хорошо согласуются как между собой, так и с данными из работ [35, 37, 38]. Из результатов моделирования, проведенного по методикам ПАМД и OFMD для

серебра, также видно, что относительное различие результатов для коэффициента  $D$  уменьшается при повышении температуры плазмы и/или при снижении ее плотности, т. е. при уменьшении параметра кулоновской неидеальности  $\Gamma_{II}$ . При этом результаты расчетов по формуле (18), основанной на данных ПАМД-моделирования, также приближаются к данным OFMD.

В большинстве случаев, рассмотренных в табл. 2, относительные отличия  $D_{ПАМД}$  от  $D_{OFMD}/D_{TFMD}$  не превышает 10–12 %, а  $D_{fit}$  (18) — 20 %. Исключение составляет случай плазмы железа при  $\rho = 34.5$  г/см<sup>3</sup> и  $T = 100$  эВ (см. табл. 2): величина коэффициента ионной самодиффузии в результате ПАМД-моделирования оказывается меньше значения, которое дает метод TFMD [35], примерно на 20 %, а аппроксимация (18) — на 23 %. Однако поскольку в данном случае хорошо согласуются характеристики ионной микроструктуры вещества ( $g_{II}(r)$ ), полученные по ПАМД и TFMD [9] (см. рис. 2)<sup>6)</sup>, а также имеется взаимное согласие между  $D_r$  и  $D_v$ , то несколько большее различие значений  $D_{ПАМД}$  и  $D_{TFMD}$  по-видимому связано с методическими особенностями вычисления АКФ скорости в работе [35] в сравнении с расчетами методом ПАМД и другими

<sup>6)</sup> Расчеты  $g_{II}(r)$  [9] проводились теми же авторами и по той же модели, что и в работе [35].





**Рис. 3.** Изохоры коэффициента ионной самодиффузии ( $\rho/\rho_0 = 1, \dots, 5$ ; сверху вниз) в плотной плазме Al ( $\rho_0 = 2.7 \text{ г/см}^3$ ), Fe ( $\rho_0 = 7.87 \text{ г/см}^3$ ), Cu ( $\rho_0 = 8.92 \text{ г/см}^3$ ), Ag ( $\rho_0 = 10.5 \text{ г/см}^3$ ) и Au ( $\rho_0 = 19.3 \text{ г/см}^3$ ). Точки — результаты ПАМД-моделирования (343 атома,  $D_{\text{ПАМД}} = (D_r + D_v)/2$ ). Сплошные линии — расчет по формуле (18) с коэффициентами аппроксимации из (25)–(29)

расчетами методом OFMD/TFMD, представленными в табл. 2.

Отметим также, что в работе [35] не указана статистическая неопределенность результата вычисления  $D_{\text{TFMD}}$ , тогда как при учете такой неопределенности интервалы значений  $D_{\text{ПАМД}}$  и  $D_{\text{OFMD}}$  из табл. 2 существенно перекрываются.

Результаты расчетов коэффициента ионной самодиффузии в плазме Al, Fe, Cu, Ag и Au по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (18) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (25)–(29) представлены на рис. 3. Рассмотрен достаточно широкий диапазон температур и плотностей, отвечающий области определения выражений вида (18), указанной в табл. 1. В большинстве случаев аппроксимирующие кривые проходят внутри диапазона статистической неопределенности результата ПАМД-расчетов, составляющего примерно 10 %, что указывает на возможность практического использования аппроксимации (18) вме-

сто прямого моделирования. Как следует из рис. 3, интенсивность самодиффузии существенно возрастает при ослаблении межйонного взаимодействия при увеличении температуры вещества и/или снижении его степени сжатия. При этом коэффициент самодиффузии может быть аппроксимирован степенными зависимостями:

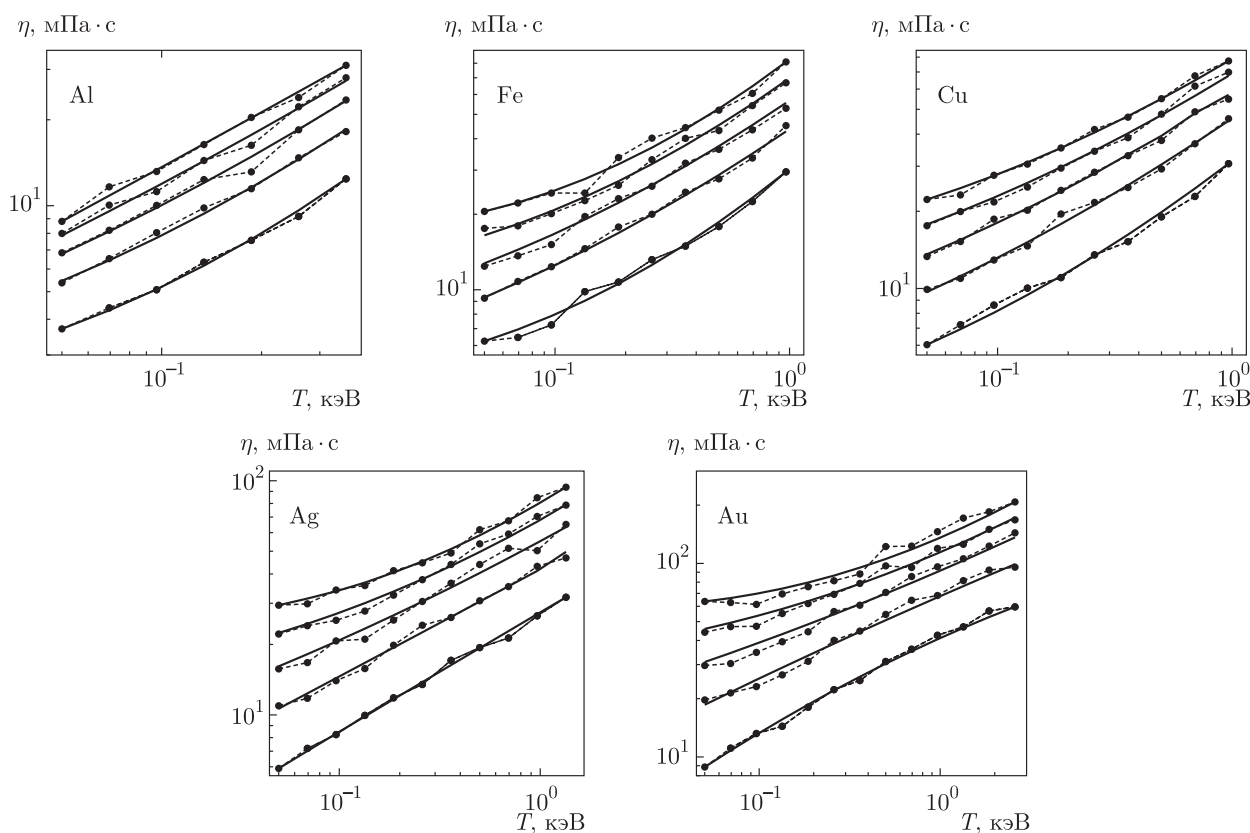
$$\begin{aligned} D_{\text{Al,Fe,Cu,Ag}} &\propto T^{0.7}, \\ D_{\text{Al,Fe,Cu,Ag}} &\propto (\rho/\rho_0)^{-(0.4-0.7)}. \end{aligned} \tag{31}$$

При этом каких-либо нерегулярностей в поведении коэффициента  $D$  в рассмотренных случаях не наблюдается.

В табл. 3 представлены результаты сравнительных расчетов коэффициента динамической вязкости плазмы Al, Fe, Cu и Ag методами ПАМД (343 атома), OFMD/TFMD [38, 40] и по формуле (17) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (19)–(22). Относительные различия коэффициентов

**Таблица 3.** Сравнение результатов расчетов коэффициента динамической вязкости  $\eta$  для плазмы Al, Fe, Cu и Ag по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (17) с данными расчетов по методу OFMD. В круглых скобках приведено относительное отличие результатов данной работы от значений, полученных методом OFMD. Характерная статистическая погрешность расчетов по методике ПАМД не превышает 15 %, по методике OFMD/TFMD — 10–15 %

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	Коэффициент вязкости $\eta, \text{мПа} \cdot \text{с}$		
			OFMD	ПАМД	Формула (17)
Al	13.4	100	13 [38]	$13.8 \pm 1.5$ (+6 %)	13.6 (+5 %)
Fe	34.5	100	23 [40]	$21.6 \pm 3.4$ (-6 %)	22.4 (-3 %)
	39.65	1000	90 [40]	$80.6 \pm 9.3$ (-10 %)	83.5 (-7 %)
Cu	21.6	100	16 [38]	$16.4 \pm 1.3$ (+3 %)	15.2 (-5 %)
Ag	30.9	100	19 [38]	$20.9 \pm 2.3$ (+10 %)	20.5 (+8 %)



**Рис. 4.** Изохоры коэффициента динамической вязкости ( $\rho/\rho_0 = 1, \dots, 5$ ; снизу вверх) в плотной плазме Al ( $\rho_0 = 2.7 \text{ г/см}^3$ ), Fe ( $\rho_0 = 7.87 \text{ г/см}^3$ ), Cu ( $\rho_0 = 8.92 \text{ г/см}^3$ ), Ag ( $\rho_0 = 10.5 \text{ г/см}^3$ ) и Au ( $\rho_0 = 19.3 \text{ г/см}^3$ ). Точки — результаты ПАМД-моделирования (343 атома). Сплошные линии — расчет по формуле (17) с коэффициентами аппроксимации из (19)–(23)

вязкости, определенных разными способами, для всех рассмотренных случаев не превышают 10–13 %.

На рис. 4 приведены результаты расчетов коэффициента динамической вязкости в плазме Al,

Fe, Cu, Ag и Au по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (17) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (19)–(23). Диапазоны температур и плотностей соответствуют области опре-

деления выражений вида (17) из табл. 1. Использование аппроксимирующих выражений позволило сгладить ход некоторых кривых, особенно при больших сжатиях вещества. Аппроксимирующие кривые для большинства точек проходят внутри диапазона статистической неопределенности результата ПАМД-расчетов вязкости (около 15%), что, как и в случае коэффициента ионной самодиффузии, указывает на возможность практического использования аппроксимации (17) вместо прямого моделирования. Из рис. 4 следует, что коэффициент динамической вязкости слабо чувствителен к росту температуры плазмы, причем зависимость ослабевает с ростом атомного номера вещества:

$$\eta_{Al} \propto T^{0.6}, \quad \eta_{Fe} \propto T^{0.5}, \quad \eta_{Ag} \propto T^{0.4}. \quad (32)$$

В то же время зависимость коэффициента вязкости от степени сжатия плазмы  $\rho/\rho_0$  усиливается при переходе к более тяжелым элементам:

$$\begin{aligned} \eta_{Al} \propto (\rho/\rho_0)^{0.65}, \quad \eta_{Fe} \propto (\rho/\rho_0)^{0.7}, \\ \eta_{Ag} \propto (\rho/\rho_0)^{0.8}. \end{aligned} \quad (33)$$

### 3.4. Результаты расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы урана

В работе [36] представлено детальное расчетно-теоретическое исследование переносных свойств ионной подсистемы плазмы урана — наиболее тяжелого элемента, встречающегося в естественных условиях и имеющего важное прикладное значение. Это исследование проведено на основе данных по коэффициентам динамической вязкости и ионной самодиффузии, полученных в широком интервале плотностей и температур плазмы урана с помощью OFMD-моделирования системы из 54 атомов. Неопределенность результатов моделирования оценивалась на уровне 20% для динамической вязкости и 10% для коэффициента ионной самодиффузии. Такая неопределенность была обусловлена как влиянием статистического усреднения, так и применяемой в работе [36] процедурой аппроксимации интегралов по времени от АКФ скорости и тензора вязких напряжений с последующей экстраполяцией таких аппроксимаций в область больших значений временного аргумента (см., например, [54]). Поскольку в настоящей работе временная эволюция системы описывалась более подробно, чем при OFMD-моделировании [36]<sup>7)</sup>,

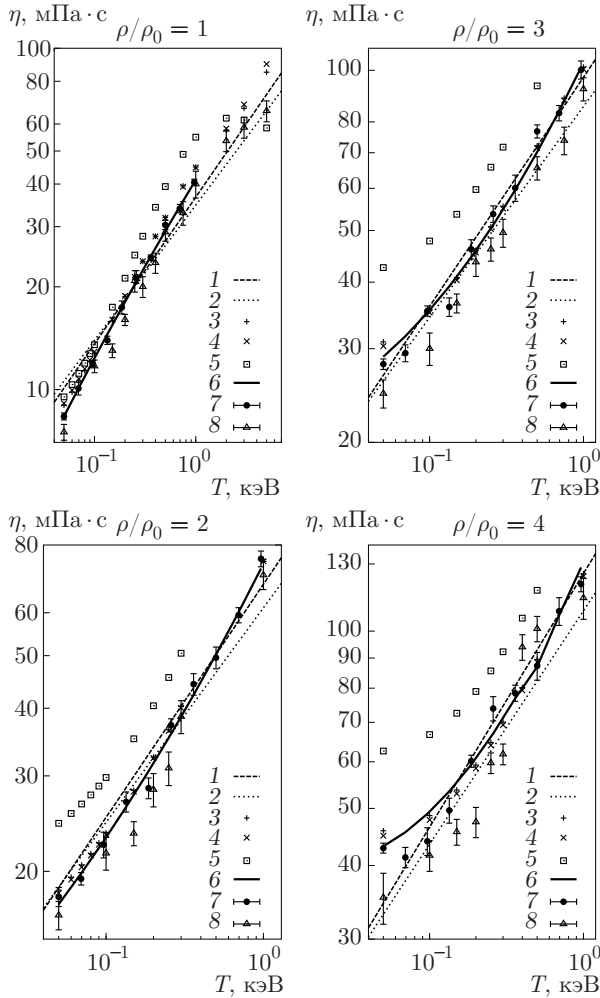
<sup>7)</sup> Шаг расчета по времени составлял 0.15 фс, тогда как в работе [36] — 2.5–5 фс.

а общая экономичность метода ПАМД и реализованной методики расчета позволяли проводить моделирование эволюции системы с необходимой длительностью, подобные процедуры упрощенного вычисления временных интегралов не применялись. Это обстоятельство, очевидно, является одной из причин, обуславливающих появление систематических различий результатов проведенного ПАМД-моделирования и данных работы [36].

Сравнение результатов моделирования коэффициента динамической вязкости по методикам ПАМД и OFMD [36], а также расчетов по формуле (17) дано на рис. 5, где также представлены результаты расчетов коэффициента вязкости по аппроксимационным формулам, построенным на основе расчетных данных по различным приближенным моделям для однокомпонентной плазмы ионов [55–57]. При этом использование аппроксимаций [55–57] предполагает предварительное вычисление величины среднего заряда иона в плазме, которая может быть определена различными способами<sup>8)</sup>. В нашей работе средний заряд иона рассчитывался по квантово-статистической модели среднего атома RESEOS [15, 58–60] в рамках модели Либермана [3, 61] как число электронов непрерывного спектра, приходящееся на одно ядро, плотность состояний которых описывалась асимптотическим квазиклассическим выражением пропорциональным  $\sqrt{\epsilon}$  ( $\epsilon$  — энергия электрона). Такой способ определения среднего заряда иона позволил наилучшим образом описать результаты OFMD-моделирования вязкости урана [36] в приближениях [55, 56]. Приближение [57] приводит к существенно завышенным значениям вязкости плазмы урана во всем рассматриваемом диапазоне.

При относительном сжатии  $\rho/\rho_0 = 1-4$  значения динамической вязкости плазмы урана, полученные по аппроксимационным формулам (17) и [55, 56], хорошо согласуются между собой (см. рис. 5), причем эти аппроксимации приводят к результатам, которые в целом лучше согласуются именно с данными ПАМД-моделирования, чем с OFMD [36]. Для плазмы урана наиболее явно это проявляется при  $\rho/\rho_0 = 3-4$ . При умеренном сжатии вещества (вплоть до  $\rho/\rho_0 = 2-3$ ) аппроксимация (17) согласуется с результатами OFMD-моделирования [36] несколько лучше, чем аппроксимации [55, 56], хотя

<sup>8)</sup> Отметим, что применение формул (17) и (18) не предполагает дополнительного расчета степени ионизации плазмы, как при использовании аппроксимаций [55, 56].



**Рис. 5.** Изохоры коэффициента динамической вязкости для плазмы урана ( $\rho_0 = 18.93 \text{ г/см}^3$ ): 1, 2 — расчеты по (34), основанные на данных моделирования соответственно методами ПАМД и OFMD [36]; 3–5 — расчеты с использованием аппроксимаций, построенных на основе приближенных моделей для однокомпонентной плазмы ионов [55–57], со средним зарядом иона, полученным по модели среднего атома RESEOS [15, 58], 6 — расчеты по формуле (17) с коэффициентами аппроксимации из (24), 7 — результаты ПАМД-моделирования (343 атома; формула (14)), 8 — результаты OFMD-моделирования (54 атома) [36]

взаимные различия между рассматриваемыми аппроксимациями (17) и [55, 56] невелики (6–7 %).

Коэффициент динамической вязкости плазмы урана может быть также аппроксимирован степенной зависимостью [36], удобной для получения быстрых оценок:

$$\eta_{fit}^{(1)}(\rho, T) = a_\eta T^{b_\eta} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{c_\eta}, \quad (34)$$

$$[\rho] = \text{г/см}^3, \quad [T] = \text{эВ}.$$

Результаты наших расчетов дают:

$$a_\eta = 1.9, \quad b_\eta = 0.43, \quad c_\eta = 0.89.$$

На рис. 5 приведено сравнение результатов расчетов по формуле (34) с нашими коэффициентами и с коэффициентами, найденными в работе [36] (соответственно кривые 1 и 2). Зависимость (34) с нашими коэффициентами демонстрирует более высокую скорость роста при любых рассмотренных значениях плотности, чем аналогичная кривая, основанная на данных OFMD. При относительном сжатии  $\rho/\rho_0 = 2-4$  и температуре  $T \geq 200 \text{ эВ}$  результаты расчетов по формулам (17), (34) и по моделям [55, 56] хорошо согласуются как между собой, так и с данными OFMD- и ПАМД-моделирования. В указанных условиях аппроксимационная кривая 2 из [36] дает заниженные значения коэффициента вязкости (на уровне примерно 10 % по сравнению с ПАМД).

Из рис. 6 следует, что коэффициент самодиффузии  $D_{fit}(\rho, T)$  (18) при нормальной плотности плазмы урана на 7–20 % превышает значения, полученные в ходе OFMD-моделирования [36], в то время как при более высоких плотностях различия обычно не превышают 15 %. Различия между результатами моделирования коэффициентов самодиффузии по ПАМД и по OFMD обусловлены методическими особенностями и полностью укладываются в диапазон статистической погрешности. При этом простейшая аналитическая аппроксимация для коэффициента самодиффузии может быть построена аналогично (34):

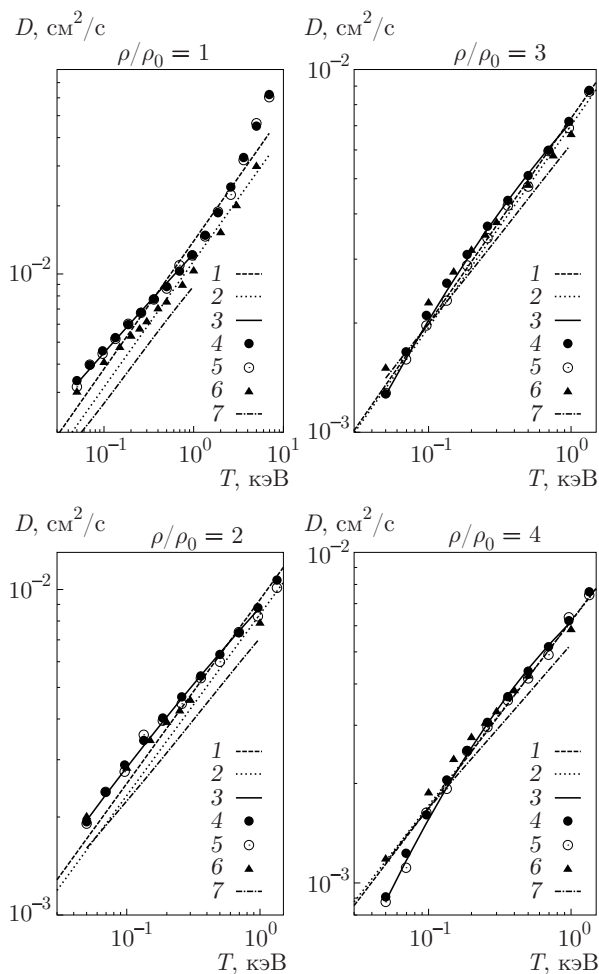
$$D_{fit}^{(1)}(\rho, T) = a_D T^{b_D} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{c_D}, \quad (35)$$

$$[\rho] = \text{г/см}^3, \quad [T] = \text{эВ}.$$

По результатам ПАМД-моделирования были подобраны коэффициенты аппроксимации:

$$a_D = 2.8 \cdot 10^{-4}, \quad b_D = 0.57, \quad c_D = -0.59.$$

Формула (35) при  $\rho/\rho_0 = 2-4$  позволяет получить оценку для коэффициента самодиффузии, которая хорошо согласуется (различия менее 15 %) как с аналогичным приближением из работы [36], так и результатами расчетов по формуле (18). Отметим, что расчеты по формулам (18) и (35) при  $\rho/\rho_0 = 2-3$  описывают результаты TFMD-моделирования коэффициента диффузии в плотной плазме урана точнее, чем расчеты с использованием аппроксимаций [62, 63], так же как и [55–57], построенных на основе расчетных данных по приближенным моделям для однокомпонентной плазмы ионов.



**Рис. 6.** Изохоры коэффициента ионной самодиффузии для плазмы урана ( $\rho_0 = 18.93 \text{ г/см}^3$ ): 1, 2 — расчеты по (35), основанные соответственно на данных ПАМД и работы [36], 3 — расчеты по формуле (18) с коэффициентами аппроксимации из (30), 4, 5 — результаты ПАМД-моделирования (343 атома; формулы (12) и (13) соответственно), 6 — результаты OFMD-моделирования (54 атома) [36], 7 — расчеты с использованием аппроксимации [62, 63], построенной на основе модели для однокомпонентной плазмы ионов со средним зарядом иона, полученным по модели среднего атома RESEOS [15, 58]

#### 4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе рассмотрен квазиклассический вариант [14, 15] метода псевдоатомной молекулярной динамики (ПАМД) [16–18], представляющий собой комбинацию метода классической молекулярной динамики для ионов и теоретической модели Старретта и Саумона [22–24], позволяющей описывать ионные корреляции и рассчитывать эффективные парные потенциалы взаимодействия

ионов. Данный вариант хорошо подходит для описания ионной микроструктуры вещества и расчета ионных переносных коэффициентов в неидеальной плазме теплого и умеренно нагретого плотного вещества, требуя при этом существенно меньших вычислительных затрат по сравнению с вариантом метода ПАМД, использующим полностью квантовомеханическую версию теоретической модели Старретта и Саумона, и тем более с расчетами методом квантовой молекулярной динамики с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD и TFMD) при сопоставимой точности расчетов. Так, результаты ПАМД-моделирования, проведенного для состояний на ударной адиабате сплошного железа, показали, что полученные характеристики ионной микроструктуры вещества — ион-ионные парные корреляционные функции — хорошо согласуются с данными TFMD.

Ионные переносные коэффициенты динамической вязкости и ионной самодиффузии рассчитывались по формулам Кубо–Грина через временные интегралы от автокорреляционных функций скорости и фурье-образа тензора вязких напряжений, а также в приближении Эйнштейна–Смолуховского (для ионной самодиффузии) [49]. Проведено сравнение результатов расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы Al, Fe, Cu и Ag с данными OFMD/TFMD-моделирования, которое показало, что отличие результатов ПАМД от данных OFMD/TFMD не превышает 10–12%, заметно уменьшаясь при увеличении температуры плазмы и/или при снижении ее плотности, т. е. при уменьшении параметра кулоновской неидеальности  $\Gamma_{II}$ . Исключение составляет расчет коэффициента ионной самодиффузии в плазме железа с  $\rho/\rho_0 \approx 4.4$  и  $T = 100 \text{ эВ}$ , где величина, полученная методом ПАМД, оказывается примерно на 20% меньше, чем в результате TFMD-моделирования [35], что, по-видимому, связано с методическими особенностями вычисления АКФ скорости в работе [35].

Проведены расчеты коэффициентов динамической вязкости и ионной самодиффузии в широком диапазоне температур и плотностей, оценен характер изменения переносных коэффициентов в зависимости от плотности и температуры вещества и построены аналитические аппроксимации (17) и (18) данных широкодиапазонных ПАМД-расчетов для плазмы Al, Fe, Cu, Ag, Au и U. Наибольшая статистическая погрешность результатов ПАМД-моделирования не превышает 10% для коэффициентов ионной самодиффузии и 15% для коэффициента

вязкости<sup>9)</sup>. При использовании формулы (17) для оценки коэффициента динамической вязкости наибольшее относительное отличие результатов от данных моделирования методом OFMD не превышает 10 %. Применение аппроксимационной формулы (18) для коэффициента ионной самодиффузии приводит к результатам, отличающимся от результатов OFMD не более чем на 25 %. Таким образом, неопределенность, обусловленная применением аппроксимационных формул (17) и (18) с матрицами коэффициентов (19)–(30) для расчета ионных переносных коэффициентов, сравнима по величине со статистической погрешностью моделирования как методом ПАМД, так и методом OFMD.

Отметим, что сравнение коэффициентов динамической вязкости для умеренно сжатой плазмы урана (вплоть до  $\rho/\rho_0 = 2-3$ ), полученных по аппроксимационной формуле (17), показало несколько лучшее согласие с результатами OFMD-моделирования [36], чем при использовании известных аппроксимаций для однокомпонентной плазмы ионов [55, 56]. Кроме того, аппроксимации (18) и (35) для коэффициента ионной самодиффузии с коэффициентами, найденными по результатам ПАМД-расчетов, более точно описывают результаты OFMD-моделирования плазмы урана при  $\rho/\rho_0 = 2-3$ , чем приближение [62, 63].

Таким образом, построенные аппроксимации (17) и (18) с матрицами аппроксимационных коэффициентов (19)–(30) могут быть использованы для моделирования динамики плотного ионизованного вещества при описании экспериментов по физике высоких плотностей энергии и решении ряда планетологических задач.

## ЛИТЕРАТУРА

1. D. Marx and J. Hutter, *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
2. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, Б. В. Уваров, *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния*, Физматлит, Москва (2000).
3. D. A. Liberman, *Phys. Rev. B* **20**, №12, 4981 (1979).
4. T. T. Blenski and B. Cichocki, *Phys. Rev. E* **75**, 056402 (2007).
5. T. Blenski, R. Piron, C. Caizergues et al., *High Energy Density Phys.* **9**, 687 (2013).
6. D. C. Swift, T. Lockard, R. G. Kraus et al., *Phys. Rev. E* **99**, 063210 (2019).
7. В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов*, Изд-во Физического института им. П. Н. Лебедева РАН, Москва (1998).
8. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Физматлит, Москва (2002).
9. F. Lambert, J. Cl rouin, and G. Z rah, *Phys. Rev. E* **73**, 016403 (2006).
10. J.-F. Danel, L. Kazandjian., and G. Zerah, *Phys. Rev. E* **79**, 066408 (2009).
11. J.-F. Danel and L. Kazandjian, *Phys. Rev. E* **91**, 013103 (2015).
12. J.-F. Danel, L. Kazandjian, and R. Piron, *Phys. Rev. E* **93**, 043210 (2016).
13. D. Sheppard, J. D. Kress, S. Crockett et al., *Phys. Rev. E* **90**, 063314 (2014).
14. A. L. Falkov, A. A. Ovechkin, and P. A. Loboda, in *Book of Abstracts of Annual Moscow Workshop on the Non-Ideal Plasma Physics*, NPP, Moscow (2015), ed. by V. E. Fortov, I. L. Iosilevskiy, and P. R. Levashov, Russian Academy of Sciences, Moscow (2015), p. 10.
15. A. A. Ovechkin, P. A. Loboda, and A. L. Falkov, *High Energy Density Phys.* **20**, 38 (2016).
16. C. E. Starrett, J. Daligault, and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **91**, 013104 (2015).
17. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **93**, 063206 (2016).
18. A. A. Ovechkin, A. L. Falkov, P. A. Sapozhnikov et al., in *Book of Abstracts of XXXIII International Conference on Equation of State for Matter (Elbrus, 2018)*, ed. by V. E. Fortov, B. S. Karamurзов, V. P. Efremov et al., Russian Academy of Sciences, Moscow (2018), p. 57.
19. M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1987).
20. D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, London (2002).
21. Д. С. Рапапорт, *Искусство молекулярной динамики*, Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2012).

<sup>9)</sup> Аналогичная величина статистической погрешности характерна и для расчетов переносных коэффициентов, выполненных другими методами (см., например, [33, 36, 37]).

22. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **85**, 026403 (2012).
23. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **87**, 013104 (2013).
24. C. E. Starrett and D. Saumon, *High Energy Density Phys.* **10**, 35 (2014).
25. A. N. Souza, D. J. Perkins, C. E. Starrett et al., *Phys. Rev. E* **89**, 023108 (2014).
26. L. B. Fletcher, H. J. Lee, T. Döppner et al., *Nature Photonics* **9**, 247 (2015).
27. H. M. Van Horn, *Science* **252**, 3848 (1991).
28. R. A. Secco, in *Mineral Physics and Crystallography*, ed. by T. J. Ahrens, American Geophysical Union, Washington (1995), p. 218.
29. G. A. de Wijs, G. Kresse, L. Vočadlo et al., *Nature* **392**, 805 (1998).
30. D. Alfé, G. Kresse, and M. J. Gillan, *Phys. Rev. B* **61**, №1, 132 (2000).
31. M. D. Ruter, R. A. Secco, H. Liu et al., *Phys. Rev. B* **66**, №6, 060102 (2002).
32. В. Н. Жарков, *УФН* **179**, 106 (2009).
33. M. Pozzo, C. Davies, D. Gubbins et al., *Phys. Rev. B* **87**, 014110 (2013).
34. К. Д. Литасов, А. Ф. Шацкий, *Состав и строение ядра Земли*, издательство СО РАН, Новосибирск (2016).
35. F. Lambert, J. Clérouin, and S. Mazevet, *Europhys. Lett.* **75**, №5, 681 (2006).
36. J. D. Kress, J. S. Cohen, D. P. Kilcrease et al., *High Energy Density Phys.* **7**, 155 (2011).
37. C. Ticknor, J. D. Kress, and L. A. Collins, *Phys. Rev. E* **93**, 063208 (2016).
38. A. J. White, L. A. Collins, J. D. Kress et al., *Phys. Rev. E* **95**, 063202 (2017).
39. K. P. Driver, B. Militzer, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155502 (2012).
40. G. Faussurier, C. Blancard, P. Cossé et al., *Phys. Plasm.* **17**, 052707 (2010).
41. G. Chabrier, *J. Phys. France* **51**, 1607 (1990).
42. S. Ichimaru and K. Utsumi, *Phys. Rev. B* **24**, 7385 (1981).
43. Н. П. Коваленко, И. З. Фишер, *УФН* **108**, 209 (1972).
44. R. Piron and T. Blenski, *Phys. Rev. E* **83**, 026403 (2011).
45. D. Ofer, E. Nardi, and Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. A* **38**, 5801 (1988).
46. M. Manninen, R. Nieminen, P. Hautajarvi et al., *Phys. Rev. B* **12**, 4012 (1975).
47. Н. С. Бахвалов, *Численные методы*, Наука, Москва (1973).
48. G. Pantis, *J. Comp. Phys.* **17**, 229 (1975).
49. J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, New York (2006).
50. D. Dubbeldam, D. C. Ford, D. E. Ellis et al., *Molecular Simulation* **35**, №№12–13, 1084 (2009).
51. J.-F. Danel, L. Kazandjian, and G. Zerah, *Phys. Rev. E* **85**, 066701 (2012).
52. В. Е. Фортов, *Мощные ударные волны на Земле и в космосе*, Физматлит, Москва (2019).
53. J. M. J. Van Leeuwen, J. Groeneveld, and J. de Boer, *Physica* **25**, 792 (1959).
54. E. R. Meyer, J. D. Kress, L. A. Collins et al., *Phys. Rev. E* **90**, 043101 (2014).
55. S. Bastea, *Phys. Rev. E* **71**, 056405 (2005).
56. J. Daligault, K. S. Rasmussen, and S. D. Baalrud, *Phys. Rev. E* **90**, 033105 (2014).
57. J. Wallenborn and M. Baus, *Phys. Rev. A* **18**, №4, 1737 (1978).
58. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, V. G. Novikov et al., *High Energy Density Phys.* **13**, 20 (2014).
59. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, and А. Л. Фальков, *High Energy Density Phys.*, **30**, 29 (2019).
60. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, А. Л. Фальков et al., *Phys. Rev. E* **103**, 053206 (2021).
61. B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne et al., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* **99**, 658 (2006).
62. J. Daligault, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 065003 (2006).
63. J. Daligault, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 029901 (2009).