

ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ РАЗОГРЕТЫХ ПЛОТНЫХ ВЕЩЕСТВ**Г.Э. Норман, И.Ю. Скобелев, В.В. Стегайлов***Объединённый институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Ижорская ул., 13, стр.2***Аннотация**

Рассматриваются возбужденные состояния разогретых плотных веществ (РПВ, WDM - warm dense matter). Основное внимание уделяется подклассу РПВ, который можно назвать структурированным РПВ и которое обладает одновременно свойствами кристалла и свойствами электронной частично (или полностью) ионизованной плазмы. Кратко рассмотрены способы создания структурированных РПВ и возможные способы его диагностики. Приведены примеры проявления структурированным РПВ кристаллических и плазменных свойств. Теория функционала электронной плотности в конечно-температурной формулировке используется для описания г.ц.к. кристалла фторида лития в двухтемпературном разогретом плотном состоянии с горячими электронами и холодной решеткой, которое образуется после сверхбыстрого энерговысвобождения. Анализируются устойчивость решетки и межатомное взаимодействие при повышенных электронных температурах. Методы молекулярной динамики и радиационно-столкновительной кинетики использованы для изучения плазменных свойств структурированных РПВ.

EXCITED STATES OF THE WARM DENSE MATTER

The excited states of the warm dense matter (WDM) are considered. The main attention is paid to the so called structured warm dense matter (SWDM). The SWDM has partly (or fully) ionized plasma properties as well as crystal ones. The methods for WDM creation is described shortly. We give situations where SWDM demonstrates crystal or plasma features. The finite temperature density functional theory approach is deployed for description of the fcc LiF crystal in a two-temperature warm dense matter state with hot electrons and cold lattice that is formed after ultrafast energy deposition. The lattice stability and the interatomic bonding at elevated electronic temperatures are studied. The methods of molecular dynamics and collisional-radiative kinetics are used to investigate the plasma properties of WDM.

1. ВВЕДЕНИЕ

Термин WDM (warm dense matter) в англоязычной литературе существует уже около двух десятилетий. Он начал использоваться для обозначения сверхплотной плазмы (т.е. плазмы с плотностью близкой к твердотельной) нагретой до температуры, большей, чем верхняя граница низкотемпературной плазмы (1 эВ), но меньшей, чем нижняя граница высокотемпературной плазмы (100 эВ). В русскоязычной литературе устойчивого аналогичного термина пока не появилось, и мы будем ниже использовать для обозначения такой плазмы сочетание «разогретое плотное вещество», или просто РПВ.

На первый взгляд, кажется, что термин РПВ относится к очень узкому классу состояний вещества. Действительно, он сильно ограничивает область как возможных значений плотности плазмы (диапазоном $10^{22} \text{ см}^{-3} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$), так и температуры (диапазоном 1 – 100 эВ). Однако, на самом деле этот термин даже излишне широк, поскольку объединяет в один класс слишком разные состояния вещества. Например, к РПВ может относиться как идеальная, так и неидеальная плазма, как вырожденная, так и невырожденная и т.п. В частности, в настоящей работе основное внимание уделяется некоторому подклассу РПВ, который можно назвать структурированным РПВ. Структурированное РПВ – это состояние, обладающее одновременно свойствами кристалла и свойствами электронной частично ионизованной плазмы.

2. СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ СТРУКТУРИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ РПВ И ИХ ДИАГНОСТИКА

Создать РПВ очень легко. Это можно сделать с помощью лазеров ИК, видимого или УФ диапазонов (см., например, [1–5]), пучком быстрых ионов или даже одиночным быстрым ионом (см., например, [6–8]), электровзрывом проводников (см., например, [9]). В последнее время для создания РПВ стали использоваться рентгеновские лазеры на свободных электронах [10]. Возможно использование комбинированных способов, когда, например, сначала с помощью мощного лазерного импульса генерируются потоки быстрых протонов, которые затем и создают РПВ [11]. Во всех случаях важно только одно – время нагрева должно быть меньше времени разлета образовавшейся плазмы.

Для создания структурированного РПВ на длительность импульса накачки нужно наложить еще более жесткое ограничение. Теперь время нагрева должно быть меньше времени разрушения кристаллической решетки нагреваемого вещества. Заметим, что это время может быть на порядок короче, чем время разлета плазмы. Впрочем, если импульс накачки более длительный, то структурированное РПВ также образуется, но время жизни такого состояний будет небольшим, после чего оно станет просто РПВ.

Гораздо сложнее провести диагностику РПВ. Наиболее универсальными способами диагностики плазмы, как известно, являются спектроскопические. Поскольку температура РПВ может быть сравнительно невелика, то, как правило, РПВ излучает интенсивные спектральные линии, лежащие в видимой области

спектра. Однако, для таких линий РПВ оказывается оптически толстым (напомним, что плотность РПВ твердотельная), что сразу резко ограничивает возможности спектральной диагностики. Использование же оптически тонких рентгеновских спектральных линий во многих случаях оказывается невозможным без каких-либо дополнительных ухищрений из-за высоких энергий их возбуждения и низкой температуры РПВ. Конечно, это не относится к интервалу температур, примыкающих к верхней границе 100 эВ, где мягкие рентгеновские и УФ-спектры прекрасно возбуждаются и достаточно легко могут быть использованы в задаче диагностики (см., например, [5]).

Тем не менее, рентгеноспектральная диагностика может использоваться при исследованиях РПВ. Для этого можно, например, дополнительно воздействовать на РПВ не слишком мощным потоком быстрых электронов, которые будут заселять уровни ионов с большой энергией возбуждения, но не будут менять макроскопические параметры РПВ [3]. В некоторых случаях РПВ создается высокоэнергетичными частицами, и проблема возбуждения рентгеновских переходов вообще не возникает [12–14].

Во всех ситуациях для диагностики РПВ могут использоваться радиографические методы – просвечивание РПВ внешним рентгеновским источником [15,16]. Отметим, что в [16] создание РПВ происходило под воздействием некогерентного рентгеновского излучения.

Ниже мы дадим примеры проявления структурированным РПВ кристаллических и плазменных свойств. Теория функционала электронной плотности в конечно-температурной формулировке будет использоваться для описания г.д.к. кристалла фторида лития в двухтемпературном разогретом плотном состоянии с горячими электронами и холодной решеткой, которое образуется после сверхбыстрого энерговыклада. Методы молекулярной динамики и радиационно-столкновительной кинетики будут использованы для изучения плазменных свойств структурированных РПВ.

3. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУРИРОВАННЫХ РПВ

3.1. Устойчивость кристалла LiF в разогретом плотном состоянии

Современные технологии дают возможность беспрецедентно быстрых энерговыкладов в конденсированную фазу, что приводит к новым типам задач для теории и компьютерного моделирования. Электромагнитное поле создает сильные возбуждения в электронной системе твердого тела и приводит к двухтемпературно-му разогретому плотному состоянию (warm dense matter). Поскольку соответствующее изменение в электронном распределении может быть практически мгновенным в сравнении с характерными временами движения ядер, происходит быстрое изменение эффективного ландшафта поверхности потенциальной энергии кристаллической решетки и сил действующих на атомы. Это может приводить к потере устойчивости кристаллической решетки и ее аморфизации (т.н. нетермическому плавлению) до того, как энергия переходит от электронов в решетку в результате электрон-фононного взаимодействия. Недавно на фемтосекундном рентгеновском лазере были проведены эксперименты по сверхбыстрому

энерговыкладу в LiF [17]. Цель данного исследования заключается в использовании первопринципных квантово-механических расчетов для описания изменений в межатомных взаимодействиях в кристалле LiF в данном переходном неравновесном состоянии разогретого плотного состояния.

Конечно-температурная формулировка теории функционала электронной плотности – инструмент для исследования разогретого плотного состояния. Теоретический подход, используемый в данной работе, основан на конечно-температурной формулировке теории функционала электронной плотности (КТ-ТФП). Исходная теория ТФП, направленная на расчет основного состояния многоэлектронной системы во внешнем потенциале, была обобщена на случай конечных температур путем рассмотрения электронных возмущений в усредненном статистическом смысле [18]. Этот подход был использован в работе [19] для молекулярно-динамических (МД) расчетов. Влияние конечной электронной температуры на динамику ядер проявляется в виде зависимости эффективного ландшафта потенциальной энергии вместе с хеллман-файнмановскими силами, которые рассчитываются по зависимости свободной энергии электронной подсистемы (а не энергии основного состояния) от положений ядер. Соответствующее использование борн-оппенгеймерского приближения в терминах свободной энергии для описания динамики ядер означает, что электронная подсистема эволюционирует с неявным учетом некогерентных электронных переходов. Данная модель является адекватной в случае, когда времена релаксации электронной подсистемы намного меньше, чем времена электрон-фононной релаксации (см., напр., [20]).

КТ-ТФП МД моделирование лазернонагретого Si показало, что наличие большой концентрации возбужденных электронов смягчает ковалентные связи в кристалле таким образом, что под действием подобного изменения межатомного потенциала решетка плавится нетермическим образом. Более детальный анализ в той же теоретической модели, выполненный при изучении возникновения мягкой моды в лазерновозбужденном теллуре, показал различие результатов в случае приближения фиксированной плотности электрон-дырочной плотности и приближения фиксированной электрон-дырочной температуры [21].

Для того чтобы количественно характеризовать влияние электронных возбуждений на поверхность потенциальной энергии были проведены расчеты фононного спектра решетки при различных электронных температурах вплоть до 6 эВ для трех репрезентативных систем: полупроводника (Si), простого металла (Al) и d-металла (Au) [22]. Анализ фононных спектров показал, что в то время как решетка кремния становится неустойчивой при увеличении электронной температуры, металлы наоборот становятся более устойчивыми, их температуры Дебая повышается, увеличиваются упругие модули и температура плавления. Было показано, что данный эффект мал для таких металлов, как алюминий, в которых электроны близки к свободным, но значительно возрастает в благородных металлах, например, в золоте. Этот факт объясняется в [22] влиянием локализованных d-электронов.

Важной областью применения КТ-ТФП, демонстрирующее предсказательную силу данного подхода, является расчет проводимости конденсированных фаз при ненулевых температурах. Моделирование перехода металл-неметалл в солевых растворах металлов [23, 24], расчеты электропроводности разогретых плотных Al [25,26], Cu [27], Au [28] и воды [29] показывают хорошее согласие с экспериментальными данными.

Исходя из недавних экспериментов [17] в данной работе мы используем КТ-ТФП для изучения кристалла LiF после возбуждения электронной подсистемы.

Модель. Расчеты в рамках КТ-ТФП были выполнены с помощью пакета VASP [30], основанного на базе плоских волн. 2s электроны атомов лития и 2s и 2p электроны атомов фтора рассматриваются в качестве валентных. Используются PAW псевдопотенциалы для эффективного описания совместного потенциала для электронов ядра и электронов кора [31]. Обменно-корреляционная компонента полной энергии системы описывается в градиентном приближении (GGA). Для расчета акустических ветвей дисперсионных зависимостей фононов используется метод малых смещений [32].

Результаты. Увеличение электронной температуры приводит к изменению плотности электронных состояний в кристалле (рис.1). Энергии s-зон понижаются в сравнении с нормальными условиями.

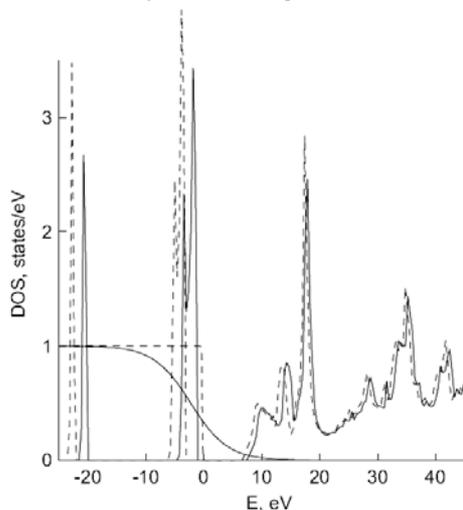


Рис. 1. Плотность электронных состояний в г.д.к. решетке LiF при различных электронных температурах: $T_e = 0$ (сплошная линия) и $T_e = 3.2$ эВ (пунктирная линия). Также показаны соответствующие ферми-дираковские распределения чисел заполнения.

Соответствующее перераспределение электронной плотности в элементарной ячейке показано на рис.2. Видно, что электронная плотность s-электронов, локализованная при $T_e = 0$ вокруг атома фтора, частично переходит в две звездоподобных области между атомами Li и F. Это свидетельствует о том, что имеющая место при нормальных условиях сильная ионная связь LiF приобретает ковалентный характер в результате возбуждения электронной подсистемы.

Сопутствующее изменение эффективного межйонного потенциала должно приводить к изменениям в механической устойчивости г.д.к. решетки.

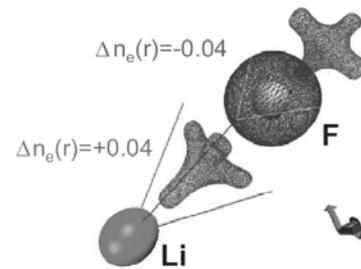


Рис. 2. Элементарная ячейка г.д.к. кристалла LiF. Показаны поверхности постоянного значения разницы объемных распределений электронной плотности при различных электронных температурах $\Delta n_e = n_e(r)|_{3.2\text{эВ}} - n_e(r)|_{0.0\text{эВ}}$: $\Delta n_e = -0.04$ (сферическая поверхность вокруг атома) и $\Delta n_e = +0.04$ (две звездообразных области между атомами Li и F)

Для количественного описания этих изменений были проведены расчеты дисперсии акустических колебаний в решетке (рис.3). Результаты для $T_e = 0$ находятся в хорошем согласии с недавними подробными расчетами [33]. Рис.3 показывает, что решетка остается устойчивой при электронной температуре 2.0 эВ, однако при температуре 3.2 эВ появляется мягкая акустическая мода, что говорит о потере механической устойчивости исходной г.д.к. структуры и возможности нетермического плавления. Описание г.д.к. LiF в градиентном (GGA) приближении занижает величину запрещенной зоны широкозонного диэлектрика LiF. Поэтому приведенные значения электронной температуры имеют более качественный, чем строго количественный характер.

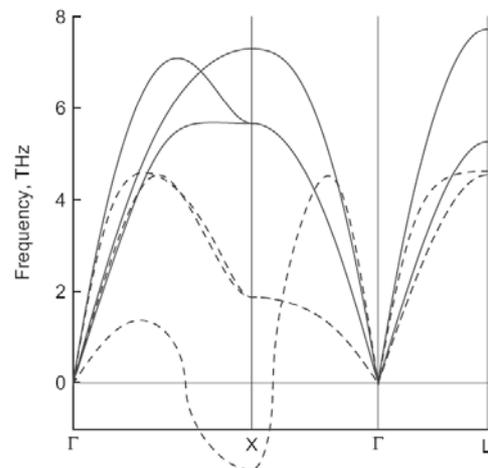


Рис. 3. Акустические ветви дисперсионных зависимостей фононов в г.д.к. решетке LiF при различных электронных температурах: $T_e = 2.0$ эВ (сплошные линии) и $T_e = 3.2$ эВ (пунктирные линии)

Данные расчеты проведены в предположении, что электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне находятся в термодинамическом равновесии и могут быть описаны одним химическим потенциалом. Однако скорость рекомбинации в LiF может быть достаточно низкой и более адекватным приближением может являться использование двух независимых химпотенциалов для электронов и дырок [21]. Эффекты электронных возбуждений на устойчивость кристалла в данном случае будут исследованы в дальнейшем.

Выводы. Возбуждение электронной подсистемы до температур более $T_e \sim 3$ эВ приводит к потере механической устойчивости г.ц.к. кристалла LiF, что проявляется в виде возникновения мягкой моды в спектре акустических фононов и, по-видимому, должно приводить к нетермическому плавлению. Соответствующее перераспределение электронной плотности подразумевает, что исходная сильная ионная связь LiF приобретает более ковалентный характер с ростом электронной температуры.

4. ПЛАЗМЕННЫЕ СВОЙСТВА СТРУКТУРИРОВАННЫХ РПВ

4.1. РПВ, создаваемое рентгеновским лазером на свободных электронах

Недавно сообщалось об эксперименте, где РПВ получалось при воздействии рентгеновского лазера на свободных электронах FLASH на алюминиевую мишень [10]. Авторы этой работы называют получившееся состояние «exotic state of highly ionized crystalline matter». Они экспериментально обнаружили, что при воздействии на мишень рентгеновских фотонов с энергией 92.5 эВ, сначала их поглощение в мишени велико, а затем резко падает, т.е. мишень просветляется. Рассматривая элементарные атомные процессы, протекающие в плотной плазме, авторы [10] показали, что указанный эффект объясняется кинетикой L-оболочек ионов алюминия и различием в положении K-края поглощения у ионов алюминия с одной и двумя вакансиями в L-оболочке.

4.2. Образование РПВ в наноканале, генерируемом быстрым тяжелым ионом в твердом теле

Другим примером структурированного РПВ является плазма в треке быстрого одиночного тяжелого иона, образующемся при его прохождении через конденсированную среду (рис. 4). Процесс создания такой плазмы был недавно рассмотрен нами в работах [12–14], где была предложена плазменная модель релаксации, позволившая, в частности, описать рентгеновские спектры, зарегистрированные при взаимодействии тяжелых ионов пучков с твердыми и аэрогельными мишенями.

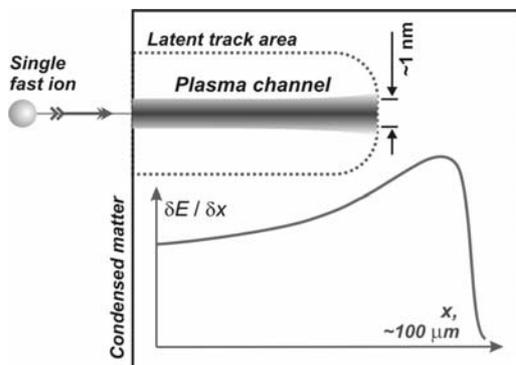


Рис. 4. Плазменный канал, создаваемый одиночным быстрым ионом при его замедлении в конденсированной среде

В плазменной модели нами были выделены три стадии формирования неравновесной неидеальной твердотельной наноплазмы в области трека.

На начальной стадии ($\sim 10^{-2}$ фс) состояние среды описывается классической атомной моделью. Образуется ионизованный канал диаметром несколько нанометров и концентрацией электронов $\sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ($Z = 2 \div 6$). Ионы с K-вакансиями сосредоточены в области оси канала, их доля мала, но они дают рентгеновские спектры.

На второй стадии (≤ 1 фс) происходит установление максвелловского распределения электронов при температуре порядка десятков эВ и вокруг наноканала формируется электрический двойной слой толщиной порядка межатомного расстояния среды.

Эволюция первоначально возникшего распределения ионов с K-вакансиями по зарядам на заключительной стадии (десятьки фс) описывается зависящими от времени уравнениями радиационно-столкновительной кинетики. Ионы сохраняют кристаллическую решетку, т.е. зонная структура не разрушается. Среда остается сильно ионизованной.

Эволюция возникшего возбужденного состояния будет описываться стандартной для плазмоподобной среды системой зависящих от времени кинетических уравнений:

$$\frac{dN_k^Z}{dt} = \sum_{m, Z'} K_{km}^{ZZ'} N_m^{Z'}, \quad (1)$$

где $N_k^Z(t)$ – населенность k -го состояния в ионе со спектроскопическим символом Z . В системе (1) $K_{km}^{ZZ'}$ представляет собой зависящую от температуры и плотности плазмы кинетическую матрицу, недиагональные элементы которой дают вероятности перехода $(m, Z') \rightarrow (k, Z)$ в результате всех элементарных процессов, а диагональные со знаком минус равны суммарной вероятности распада состояния (k, Z) .

Обычно при решении системы (1) используется так называемое квазистационарное приближение, в котором предполагается, что для возбужденных уровней производные по времени равны нулю и система (1) решается только для основных состояний, а населенности возбужденных определяются из решения существенно более простой системы алгебраических уравнений. Это соответствует случаю, когда скорости релаксации возбужденных уровней гораздо выше, чем скорости релаксации основных состояний. В случае РПВ плазмы такое приближение не является адекватным становится необходимым решать зависящие от времени уравнения, как для основных, так и возбужденных (автоионизационных) состояний ионов.

При этом необходимо учитывать в кинетической матрице следующие процессы: ионизацию электронным ударом, тройную рекомбинацию, фоторекомбинацию, радиационный распад, автоионизацию и диэлектронный захват (рис. 5).

После решения кинетической системы полную интенсивность I^Z массива неразрешаемых спутанных рентгеновских переходов, обусловленных радиационным распадом автоионизационных состояний иона со спектроскопическим символом Z и излучаемых за время существования плазмы, рассчитывалась по формуле можно получить интегрированием по времени:

$$I^Z = \int_0^{\tau_{plasma}} N_k^Z(t) A_k^Z dt \quad (2)$$

где A_k^Z – вероятность радиационного распада автоионизационного состояния k , а τ_{plasma} – время свечения плазмы.

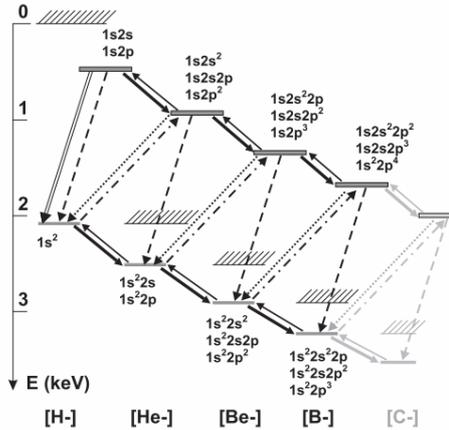


Рис. 5. Схема уровней и атомных процессов, учитываемых в плазменной модели релаксации (штриховые линии – радиационный распад, пунктирные линии – автоионизация, двойные сплошные – диэлектронный захват, тонкие сплошные – столкновительная ионизация, толстые сплошные – тройная рекомбинация, штрих-пунктир – столкновительное девозбуждение). Не показаны уровни N-, O- и F-подобных ионов

Проведенные в рамках плазменной модели релаксации расчеты позволили описать рентгеновские спектры, зарегистрированные в работах [6–8] при взаимодействии пучков ионов Ni^{14} с SiO_2 -аэрогельными мишенями плотностью 0.15 г/см^3 . Хорошее совпадение теории эксперимента (рис.6) указывает на обоснованность и самосогласованность развитой плазменной модели.

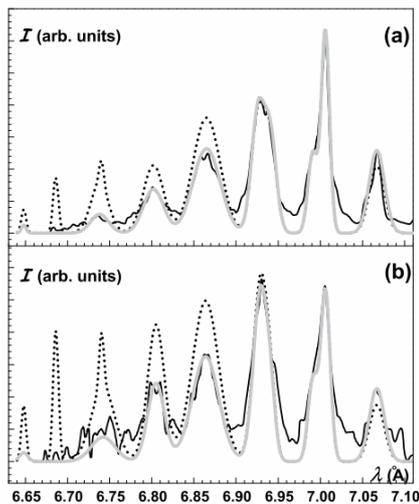


Рис. 6. Сравнение спектров [6–8], наблюдаемых из областей трека, находящихся на расстоянии 600 мкм (а) и 1400 мкм (б) от поверхности аэрогельной SiO_2 мишени (черные сплошные линии) с расчетами по атомной (пунктирные линии), и плазменной моделям релаксации (серые сплошные линии) при $T_e = 14 \text{ эВ}$ (а) и $T_e = 25 \text{ эВ}$ (б)

Была оценена концентрация и температура электронов, найденные значения числа электронов в дебаевской сфере лежат в интервале $0.14 \div 0.32$.

Предложен рентгеноспектральный метод диагностики плазмы в треке быстрого многозарядного иона.

4.3. Исчезновение спектральных линий

Исчезновение спектральных линий в плазме, связанное с нереализацией возбужденных состояний ионов, является проявлением типично плазменных свойств. Этот эффект не есть атрибут структурированного РПВ или неидеальной плазмы, и возникает в любой достаточно плотной плазме. Недавно он был рассмотрен нами в [34], отчасти связи с появлением экспериментальной работы [35]. В указанной работе при лазерном нагреве твердотельных мишеней наблюдались эмиссионные спектры плотной плазмы, лежащие в области далекого ультрафиолета.

Типичные спектры углерода из работы [35] приведены на рис. 7, 8 отдельно для областей содержащих спектральные линии H- и He- подобных ионов углерода.

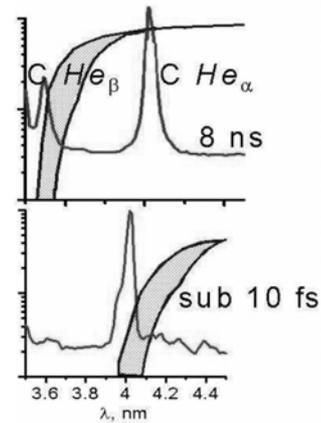


Рис. 7. Спектры He-подобных ионов углерода, полученные в [35] при длительностях лазерного импульса 8 нс и 10 фс. Монотонные кривые – результаты расчета [34] плотности состояний

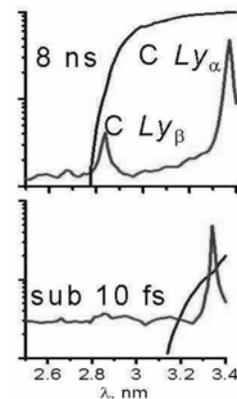


Рис. 8. Спектры H-подобных ионов углерода, полученные в [35] при длительностях лазерного импульса 8 нс и 10 фс. Монотонные кривые – результаты расчета [34] плотности состояний

Верхние спектры наблюдались при длительности лазерного импульса 8 нс, а нижние – при 10 фс. Хорошо видно, что если линии Ly_α и He_α весьма интен-

сивны в обоих случаях, то линии Lu_{β} и He_{β} наблюдаются только при достаточно большой длительности лазерного импульса 8 нс, когда плазмы твердотельной плотности фактически не образуется.

Отсутствие этих линий в работе [35] объясняется, так называемым, эффектом ионизации давлением, который удаляет верхние ионные уровни [36,37]. Потенциал иона в плазме вычисляется с использованием высокотемпературной модели Томаса–Ферми. Для такого потенциала уравнение Шредингера решается для различных орбиталей и таким образом авторы [35] определяли, какие орбитали остаются, а какие исчезают.

Поскольку возбужденные орбитали могут рассматриваться в классическом приближении, то флуктуационный подход, развитый в [34], может применяться и к рассмотрению вопроса о подавлении спектральных линий. Как видно из рис. 7, 8 результаты расчетов [34] энергетического зазора, в котором не может быть стационарных состояний, прекрасно согласуются с экспериментом [35] при среднем заряде ионов $Z = 4.5$ и электронной плотности плазмы $N_e \sim 5 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}$.

Отметим, что неопределенности в оценках плотности состояний для молекулярно динамической модели (заштрихованная область на рис.7) связаны со сложностью проведения численного моделирования идеальной плазмы.

Подчеркнем также, что подавление линий является исключительно эффектом плотности, поскольку в условиях [35] $T_e = 190 \text{ эВ}$, а, следовательно, параметр неидеальности мал $\Gamma \approx 0.1$.

4.4. Влияние кристаллических свойств структурированных РПВ на их плазменные свойства

Хотя во многих ситуациях при описании плазменных свойств структурированного РПВ можно не принимать во внимание наличие упорядоченной кристаллической решетки, бывают случаи, когда этого делать нельзя. Можно ожидать, что роль кристаллической структуры будет проявляться в плазменных свойствах, когда они определяются процессами, затрагивающими высоковозбужденные состояния ионов. Широко известно, что такая плазменная характеристика, как скорость процесса столкновительной рекомбинации как раз сильно зависит от ионных уровней, примыкающих к границе ионизации иона. Естественно предположить, что именно на ней должно в первую очередь проявляться влияние кристаллических свойств структурированного РПВ.

Мы исследовали в работах [12-14] зависимость скорости рекомбинации от характера расположения ионов в плазме. Результаты моделирования показывают, что в случае газообразной (т.е. неструктурированной) плазмы рекомбинация проходит существенно быстрее, чем в случае плазмы, когда иона фиксированы в узлах кубической кристаллической решетки. Данный эффект особенно ярко выражен при умеренной степени неидеальности плазмы, где скорости процесса могут отличаться более чем в два раза. При более высоких степенях неидеальности эффект практически исчезает. Сам эффект зависимости скорости рекомбинации от поведения ионов обусловлен тем что возникновение части пар связано с флуктуациями

ионной плотности, которые в случае ионов фиксированных в кристаллической решетке оказываются невозможны.

5. НЕРАВНОВЕСНЫЙ СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД

Как мы уже отмечали, РПВ может создаваться при электрическом взрыве проводников. Впервые на это было обращено внимание в [9], где был предложен физический сценарий начальных стадий взрыва проволочек.

Этот сценарий (см. рис. 9) подразумевает отсутствие равновесия между решеткой и электронами с самого начала взрыва. Перегрев решетки 1–2 (i) и неравновесный перегрев электронной подсистемы 1–2 (e) заканчиваются спинодальным распадом решетки 2–3' и затем происходит установление равновесия 3'–3 между электронами и ионами в неидеальной плазме. Оценки характерного времени нагрева электронной подсистемы и обмена энергией между электронами и ионами дают тот же самый порядок величины (наносекундный диапазон). Этот факт не исключает возможность рассматриваемого сценария. Из экспериментов следует, что времена релаксации для таких процессов также лежат в наносекундном диапазоне.

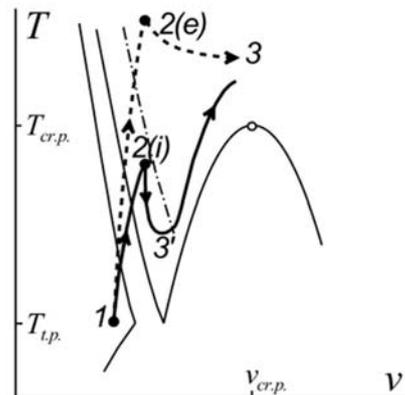


Рис. 9. Схематическое представление сценария начальной стадии неравновесного быстрого электрического взрыва проволочек. Толстые кривые определяют фазовую диаграмму металла в переменных температура T – удельный объем v . Штрих-пунктирная линия – спинопаль твердого тела: предел стабильности упорядоченной фазы. Сплошная (пунктирная) кривые со стрелками определяют эволюцию ионной (электронной) подсистем

Согласно экспериментальным результатам при электрическом взрыве проволочки могут накопить энергию, в несколько раз большую, чем энергия сублимации, еще в быстрой начальной стадии нагрева, т.е. до их разрушения. Оценки максимального перегрева при равенстве температур электронов и ионов дают не более полуторного превышения над температурой плавления. Неравновесный перегрев электронов является дополнительным фактором в рассматриваемом сценарии. Подобная проблема высокого энерговклада возникает также в физике вакуумного пятна катодной дуги. Такое же явление можно предположить и для распада плазменно-кристаллического наноканала ионного трека.

6. СПЕЦИФИКА РПВ, ПОЛУЧЕННОГО РАЗНЫМИ СПОСОБАМИ

Как мы уже отмечали выше, существует множество способов создания разогретого плотного вещества (РПВ). Для каждого из них РПВ будет обладать некоторыми специфическими чертами, не свойственными РПВ, созданному другими способами.

Например, в каких-то случаях в процессе нагрева могут играть определяющую роль фотоионизация и последующая Оже-рекомбинация (нагрев рентгеновским лазером), а в каких-то нагрев будет происходить за счет тормозного поглощения (лазеры ИК и видимого диапазонов). Возбужденное состояние РПВ может содержать ионы с вакансиями в К-оболочках (возбуждение одиночными быстрыми ионами), или только в L-оболочках (рентгеновские лазеры). Совершенно различной может быть пространственная конфигурация РПВ – тонкий плоский слой, длинный канал нанометрового диаметра, цилиндр макроразмеров. Время жизни РПВ может лимитироваться разными процессами, и составлять от десятков фемтосекунд до десятков пикосекунд и, возможно, даже наносекунд (электровзрывы проводников).

Некоторые важные свойства являются подобными для всех форм РПВ. Это короткоживущее состояние неравновесной однородной плазмы, квазистационарное в начальный период. Плазма может быть как неидеальной, так и идеальной. Время жизни определяется электрон-фононным обменом, рекомбинацией, столкновительным электронным охлаждением и др. Плазма сохраняет твердотельную плотность и имеет две температуры. Электронная температура составляет от единиц до десятков эВ. В структурированном РПВ ионы остаются холодными в первоначальных кристаллографических положениях. Однако зонная электронная структура и акустическая дисперсия изменяются из-за обратного влияния электронного возбуждения. Перераспределение электронной плотности после повышения электронной температуры может приводить к парадоксальному упрочнению решетки. Ионные остовы сохраняют свою индивидуальность после ионизации внешних оболочек. Спектральные линии излучаются ионными остовами, окруженными плазмой, которая влияет на спектры.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Само по себе разогретое плотное вещество представляет собой, в первую очередь, плотную плазму. Потому для его описания, вообще говоря, могут быть использованы стандартные подходы физики плазмы. Наиболее оправданным это представляется при рассмотрении процессов, затрагивающих внутренние электронные оболочки ионов плазмы.

Малое межионное расстояние в РПВ, или, наличие кристаллической структуры в структурированном РПВ, требуют учета кристаллических свойств при рассмотрении процессов, затрагивающих внешние электроны атомов или ионов.

Для процессов, происходящих с передачей больших энергий, в первую очередь будут проявляться плазменные свойства РПВ. Кристаллические же будут

сказываться на состояниях, расположенных вблизи непрерывного спектра (рис. 10).



Рис. 10. Переход от плазменных свойств РПВ к кристаллическим по мере приближения дискретных возбужденных состояний ионов к континууму

Другими словами, состояния, в которых электрон находится близко к ядру иона, будут проявлять плазменные свойства, а кристаллические будут формироваться электронами, находящимися далеко от ионных ядер.

Работа поддержана Программой фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН «Физико-химическая механика неравновесных систем» и грантом РФФИ 09-08-01116. Расчеты проведены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ).

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- РПВ – разогретое плотное вещество;
- WDM – warm dense matter;
- ИК – инфракрасный;
- УФ – ультрафиолетовый;
- МД – молекулярная динамика;
- КТ-ТФП – конечно-температурная формулировка теории функционала электронной плотности;
- T_e – электронная температура плазмы, эВ;
- n_e – электронная плотность плазмы, см⁻³;
- Z – заряд иона;
- $N_k^Z(t)$ – населенность k -го состояния в ионе Z , см⁻³;
- $K_{mn}^{ZZ'}$ – кинетическая матрица, с⁻¹;
- I^Z – интенсивность спектра, см⁻³с⁻¹;
- A_k^Z – вероятность радиационного распада, с⁻¹;
- τ_{plasma} – время свечения плазмы, с;
- Γ – параметр неидеальности по электрон-ионному взаимодействию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Saemann A., Eidmann K., Golovkin I.E., Mancini R.C., Andersson E., Förster E., Witte K. Isochoric Heating of Solid Aluminum by Ultrashort Laser Pulses Focused on a Tamped Target // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 4843.
2. Widmann K., Ao T., Foord M.E., Price D.F., Ellis A.D., Springer P.T., Ng A. Single-State Measurement of Electrical Conductivity of Warm Dense Gold // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 125002.
3. Hansen S.B., Faenov A.Ya., Pikuz T.A., Fournier K.B., Shepherd R., Chen H., Widmann K., Wilks S.C., Ping Y.,

- Chung H.K., Niles A., Hunter J.R., Dyer G., Ditmire T. Temperature determination using $K\alpha$ spectra from M-shell Ti ions // *Phys. Rev. E*. 2005. V. 72. P. 036408.
4. Ping Y., Hanson D., Koslow I., Ogitsu T., Prendergast D., Schwegler E., Collins G., Ng A. Broadband Dielectric Function of Nonequilibrium Warm Dense Gold // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 96. P. 255003.
 5. Zastra U., Fortmann C., Fäustlin R.R., Cao L.F., Döppner T., Dusterer S., Glenzer S. H., Gregori G., Laarmann T., Lee H. J., Przystawik A., Radcliffe P., Reinholz H., Röpke G., Thiele R., Tiggesbäumker J., Truong N. X., Toleikis S., Uschmann I., Wierling A., Tschentscher T., Förster E., Redmer R. Bremsstrahlung and line spectroscopy of warm dense aluminum plasma heated by xuv free-electron-laser radiation // *Phys. Rev. E*. 2008. V. 78. P. 066406.
 6. Rosmej O.N., Pikuz S.A. Jr., Fertman A.D., Blazevic A., Korostiy S., Mutin T., Faenov A.Ya., Pikuz T.A., Efremov V.P., Bock R., Fortov V.E., Hoffmann D.H.H. Charge state and stopping dynamics of fast heavy ions in dense matter // *Phys. Rev. A*. 2005. V. 72. P. 052901.
 7. Rosmej O.N., Pikuz S.A. Jr., Korostiy S., Blazevic A., Fertman A., Mutin T., Shevelko V.P., Efremov V.P., Pikuz T.A., Faenov A.Ya., Loboda P., Golubev A.A., Hoffmann D.H.H. Radiation dynamics of fast heavy ions interacting with matter // *Laser Part. Beams*. 2005. V. 23. P. 79.
 8. Pikuz S.A. Jr., Efremov V.P., Rosmej O., Blazevic A., Korostiy S., Fertman A., Shutov A.V., Norman H.E., Hoffmann D.H.H. Investigations of heavy-ion tracks' energy deposition inside solid media by methods of x-ray spectroscopy // *J. Phys. A*. 2006. V. 39. P. 4765.
 9. Norman G.E., Stegailov V.V., Valuev A.A. Nanosecond electric explosion of wires: from solid superheating to non-ideal plasma formation // *Contrib. Plasma Phys.* 2003. V. 43. P. 384.
 10. Nagler B., Zastra U., Fäustlin R.R., Vinko S.M., Whitcher T., Nelson A.J., Sobierajski R., Krzywinski J., Chalupsky J., Abreu E., Bajt S., Bornath T., Burian T., Chapman H., Cihelka J., Döppner T., Dusterer S., Dzelzainis T., Fajardo M., Förster E., Fortmann C., Galtier E., Glenzer S.H., Göde S., Gregori G., Hajkova V., Heimann P., Juha L., Jurek M., Khattak F.Y., Khorsand A.R., Klinger D., Kozlova M., Laarmann T., Lee H.J., Lee R.W., Meiwes-Broer K.-H., Mercere P., Murphy W.J., Przystawik A., Redmer R., Reinholz H., Riley D., Röpke G., Rosmej F., Saksil K., Schott R., Thiele R., Tiggesbäumker J., Toleikis S., Tschentscher T., Uschmann I., Vollmer H.J., Wark J.S. Turning solid aluminium transparent by intense soft X-ray photoionization // *Nature Physics*. 2009. V. 5. P. 693.
 11. Patel P.K., Mackinnon A.J., Key M.H., Cowan T.E., Foord M.E., Allen M., Price D.F., Ruhl H., Springer P.T., Stephens R. Isochoric Heating of Solid-Density Matter with an Ultrafast Proton Beam // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 125004.
 12. Ланкин А.В., Морозов И.В., Норман Г.Э., Скобелев И.Ю. О релаксации среды после ее возбуждения одиночными быстрыми тяжелыми ионами // *ЖЭТФ*. 2008. Т. 133. С. 701 - 717.
 13. Faenov A.Ya., Lankin A.V., Morozov I.V., Norman G.E., Pikuz S.A. Jr., Skobelev I.Yu. Strongly Coupled Nonequilibrium Nanoplasma Generated by a Fast Single Ion in Solids // *Contrib. Plasma Phys.* 2009. V. 49. P. 469 - 478.
 14. Lankin A.V., Morozov I.V., Norman G.E., Pikuz S.A. Jr., Skobelev I.Yu. Solid-density plasma nanochannel generated by a fast single ion in condensed matter // *Phys. Rev. E*. 2009. V. 79. P. 036407.
 15. Rosmej F.B., Lee R.W., Riley D., Meyer-ter-Vehn J., Krenz A., Tschentscher T., Tauschwitz An., Tauschwitz A., Lisitsa V.S., Faenov A.Ya. Warm Dense Matter and Strongly Coupled Plasmas Created by Intense Heavy Ion Beams and XUV-Free Electron Laser: An Overview of Spectroscopic Methods // *J. Phys. Conf. Ser.* 2007. V. 72. P. 012007.
 16. Riley D., Weaver I., McSherry D., Dunne M., Neely D., Notley M., Nardi E. Direct observation of strong coupling in a dense plasma // *Phys. Rev. E*. 2002. V. 66. P. 046408.
 17. Faenov A.Y., Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Khokhlov V.A., Nishihara K., Kato Y., Tanaka M. et al. Low-threshold ablation of dielectrics irradiated by picosecond soft X-ray laser pulses // *Applied Physics Letters*. 2009. V. 94. N. 23. P. 231107.
 18. Mermin N.D. Thermal properties of inhomogeneous electron gas // *Phys. Rev.* 1965. V. 137. P. A1441-A1443.
 19. Alavi A., Kohanoff J., Parrinello M., Frenkel D. Ab initio molecular dynamics with excited electrons // *Phys. Rev. Lett.* 1994. V. 73. P. 2599-2602.
 20. Agassi D. Phenomenological model for picosecond-pulse laser annealing of semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1984. V. 55. P. 4376-4383.
 21. Tangney P., Fahy S. Density-functional theory approach to ultrafast laser excitation of semiconductors: Application to the A1 phonon in tellurium // *Phys. Rev. B*. 2002. V. 65. P. 54302.
 22. Recoules V., Clerouin J., Zerah G., Anglade P. M., Mazevet S. Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of semiconductors and metals // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 96. P. 55503.
 23. Silvestrelli P.L., Alavi A., Parrinello M., Frenkel D. Hot electrons and the approach to metallic behaviour in $Kx(KCl)_{1-x}$ // *Europhys. Lett.* 1996. V. 33. P. 551-556.
 24. Silvestrelli P.L., Alavi A., Parrinello M., Frenkel D. Non-metal-metal transition in metal molten-salt solutions // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 53. P. 12750-12760.
 25. Silvestrelli P.L. No evidence of a metal-insulator transition in dense hot aluminum: A first-principles study // *Phys. Rev. B*. 2002. V. 60. P. 16382-16388.
 26. Faussurier G., Blancard C., Renaudin P., Silvestrelli P.L. Electrical conductivity of warm expanded Al // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73. P. 75106.
 27. Clerouin J., Renaudin P., Laudernet Y., Noiret P., Desjarlais M.P. Electrical conductivity and equation-of-state study of warm dense copper: Measurements and quantum molecular dynamics calculations // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. P. 64203.
 28. Mazevet S., Clerouin J., Recoules V., Anglade P.M., Zerah G. Ab-initio simulations of the optical properties of warm dense gold // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. P. 85002. Mattsson T. R., Desjarlais M. P. Phase diagram and electrical conductivity of high energy-density water from density functional theory // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 17801.
 29. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. P. 11169.
 30. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B*. 1999. V. 59. P. 1758.
 31. Alfe D. Phon: A program to calculate phonons using the small displacement method // *Comp. Phys. Comm.* 2009.
 32. Evarestov R.A., Losev M.V. All-electron LCAO calculations of the LiF crystal phonon spectrum: Influence of the basis set, the exchange-correlation functional, and the supercell size // *J. Comp. Chem.* 2009.
 33. Lankin A., Norman G. Density and nonideality effects in plasmas // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. V. 49. No. 10.
 34. Osterholz J., Brand F., Fischer T., Hemmers D., Cerchez M., Pretzler G., Willi O., Rose S.J. Production of Dense Plasmas with sub-10-fs Laser Pulses // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 96. P. 085002.

35. Nantel M., Ma G., Gu S., Cote C.Y., Umstadter D. Pressure Ionization and Line Merging in Strongly Coupled Plasmas Produced by 100-fs Laser Pulses // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4442.
36. Maksimchuk A., Nantel M., Ma G., Gu S., Cote C.Y., Umstadter D., Pikuz S.A., Skobelev I.Yu. and Faenov A.Ya. X-ray radiation from matter in extreme conditions // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2000. V. 65. P. 367.