

На правах рукописи

Быстрый Роман Григорьевич

**Динамика электронов в неидеальной кластерной  
наноплазме**

01.04.08 – Физика плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» и в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

- Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, заведующий Отделом №4.4. — теплофизических данных Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур РАН,  
**Морозов Игорь Владимирович.**
- Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Сектора лазерно-плазменной физики высоких энергий Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН»,  
**Брантов Андрей Владимирович,**  
кандидат физико-математических наук, доцент  
Кафедры теоретической ядерной физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,  
**Корнеев Филипп Александрович.**
- Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Институт прикладной физики РАН», г. Нижний Новгород.

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 при ОИВТ РАН, расположенном по адресу: 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, корпус Л-3, экспозиционный зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02,  
к. ф.-м. н.

М.М. Васильев

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, 2017

## Общая характеристика работы

Диссертация посвящена теоретическому исследованию динамики электронов в кластерной наноплазме на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики (МД) с последующим теоретическим обобщением полученных результатов.

### Актуальность темы исследования

В последние два десятилетия активно развиваются методы производства наноматериалов, а также эксперименты по взаимодействию высокоинтенсивных лазерных импульсов с веществом. Это дало возможность проведения исследований на пересечении двух областей науки, а также обусловило интерес к физике взаимодействия мощных потоков энергии с наноматериалами.

При взаимодействии лазерного импульса с наноматериалом происходит быстрая ионизация вещества. Образовавшаяся среда имеет характерные для плазмы температуры, плотности и степени ионизации, но при этом размеры такого объекта составляют несколько нанометров. В дальнейшем мы будем называть такой объект наноплазмой. Строгие определения приведены в работе [1].

После формирования наноплазма, как правило, оказывается сильно неравновесной [1–4], электронная температура намного превышает ионную, средние степени ионизации могут сильно отличаться от равновесных при той же температуре и плотности, а главное, такая плазма быстро расширяется, и фактически превращается в пространственно однородную плазму за несколько пикосекунд.

Принципиальным отличием между традиционной плазмой и изучаемым объектом являются нанометровые размеры системы. Из него следуют основные различия в физике таких систем. Наличие большего количества горячих электронов у поверхности наноплазмы приводит к тому, что значительная часть электронов может свободно покидать систему. Таким образом плазма теряет ключевое свойство — электронейтральность, приблизительное равенство концентрации положительных и отрицательных зарядов. Возникновение нескомпенсированного положительного заряда вызывает появление в системе сильных

электростатических полей. Эти поля влияют на все процессы, происходящие в плазме: кинетику плазмы, ионизацию и рекомбинацию, оптические свойства и излучение плазмы [5–9].

Очевидным, но не простым для теоретического описания, является то, что сильные поля вызывают сильные градиенты электронной плотности: на нескольких нанометрах плотность электронов может изменяться более чем на десять порядков [1–3, 10, 11].

Свойство электронейтральности так или иначе используется во многих моделях физики плазмы. Её отсутствие приводит к тому, что известные для плазмы результаты в случае наноплазмы требуют перепроверки, введения дополнительных поправок, а иногда и полного переосмысления.

Таким образом, наноплазма – это новый малоизученный объект, который фундаментально отличается от известных плазменных систем.

## **Практическая значимость**

Эксперименты [12–14], а именно, предложенная в них схема установки, по сути, открыли новое направление исследований. Относительная дешевизна эксперимента сделала эти работы не только доступными широкому кругу научных групп, но и придала им практическую ценность. Стоимость установки в совокупности с высокоэффективной генерацией высокоэнергичных заряженных частиц и мягкого рентгеновского излучения позволяет надеяться на появление в будущем коммерчески выгодных принципиально новых генераторов заряженных частиц и излучения, которые могут быть востребованы в технике и особенно в медицине. Практическая значимость и обилие уникальных физических эффектов стали основной мотивацией для данного направления исследований и этой работы, в частности.

## **Методология и методы исследования**

Теоретическое исследование неидеальной наноплазмы наталкивается на тугую пучок проблем, традиционных для физики наноматериалов, фи-

зики сильно неравновесных процессов и физики неидеальной плазмы. Нанометровые размеры, а следовательно, маленькое число частиц в системе, затрудняет использование традиционных методов статистической физики. Сильная неравновесность системы не позволяет применять многие результаты равновесной физики плазмы, такие как, формула Саха. Высокая степень неидеальности наноплазмы на начальном этапе ее существования ограничивает применимость кинетических моделей, основанных на уравнении Власова.

Перечисленные выше свойства наноплазмы и доступные экспериментальные данные определяют методы её исследования. Естественным выходом в данной ситуации является применение первопринципного компьютерного моделирования. В этой работе за основу взят классический метод молекулярной динамики (МД). Была написана программа МД моделирования, оптимизированная для исследования неидеальной плазмы. С ее помощью проведено исследование различных процессов в кластерной наноплазме. На основе численных результатов сделаны качественные выводы о физике явлений в наноплазме, а также предложены теоретические модели наблюдаемых явлений.

### **Цели и задачи диссертационной работы**

Следует отметить, что в диссертации не предпринимается попыток охватить всё разнообразие сложных процессов в наноплазме, а основное внимание сосредоточено на процессе потери электронейтральности, термоэлектронной эмиссии из невырожденной и нерелятивистской наноплазмы, а также её оптических свойствах. Эти цели прямо следуют из представленной научной и практической значимости, а также доступных методов исследования. Термоэлектронная эмиссия и оптические свойства наноплазмы в первую очередь определяются свойствами электронной подсистемы и тесно связаны между собой. Оптические свойства определяют, как именно будет поглощаться лазерное излучение, энергия которого идет, в том числе, и на создание электронов эмиссии, а наличие uncompensated charge меняет распределение электронов в системе, тем самым, меняя её оптические свойства. Важной особенностью поставленных за-

дач является то, что в первом приближении они могут быть рассмотрены в отрыве от остальных явлений в наноплазме, таких как ионизация, рекомбинация или излучение.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Разработка комплекса программ МД моделирования неидеальной плазмы, имеющего достаточное быстродействие и точность вычислений для моделирования динамики электронов в наноплазме на временах до единиц пикосекунд.
2. Исследование с помощью МД моделирования частоты и декременты затухания основных мод электронных колебаний в неидеальной кластерной наноплазме в зависимости от размера кластера, электронной плотности и температуры. Определение влияния распределения электронной плотности в ионизированном нанокластере на отклонение частот колебаний от результатов теории Ми.
3. Построение теоретической модели электронной эмиссии из наноплазмы. Сравнение результатов данной модели с данными компьютерного моделирования и экспериментальных работ.
4. Исследование спектра флуктуаций термодинамических величин в равновесной неидеальной плазме.

### **Научная новизна**

В результате выполнения работы был разработан комплекс программ, позволивший на два порядка увеличить скорость расчётов в МД по сравнению с имевшимися аналогами и, тем самым, увеличить размер исследуемых систем до значений, недоступных ранее для прямого МД моделирования. Программа позволяет моделировать системы размером до  $2 \cdot 10^5$  частиц, в то время как однопроцессорные коды, существовавшие ранее, позволяли проводить расчеты в системах, размеры которых не превышали несколько тысяч частиц [15].

На момент написания программы это была первая реализация классической молекулярной динамики на графических ускорителях, оптимизированная для моделирования неидеальной плазмы. Написанная программа позволила получить данные об оптических свойствах наноплазмы в ранее недоступном для моделирования диапазоне размеров и температур системы. Накопленные с помощью моделирования качественные знания о физике наноплазмы позволили вывести аналитические формулы для зависимости частот колебаний от профиля электронной плотности, систему дифференциальных уравнений, описывающую эмиссию электронов, а также формулу для зависимости конечной температуры кластера от начальных параметров. На их основе удалось объяснить форму спектра электронной эмиссии из наноплазмы. Впервые представлены спектры флуктуаций давления в простейшей модели неидеальной плазмы “Кулон с отсечкой”. Дано обоснование потери точности вычислений в таких системах на основании статистической физики сильно связанных систем.

### **Научные положения, выносимые на защиту**

1. Спектры электронных колебаний в кластерной наноплазме, частоты и декременты затухания основных мод колебаний в зависимости от размера кластера, средней плотности и температуры электронов. Равновесное пространственное распределение электронной плотности в кластерной наноплазме. Теоретическая модель, объясняющая сдвиг частоты колебаний Ми в красную область спектра вследствие пространственной неоднородности плотности электронов.
2. Система дифференциальных уравнений, описывающих эмиссию электронов из наноплазмы. Приближенная формула, описывающая изменение температуры электронов в результате эмиссии в зависимости от размера кластера и начальной температуры электронов. Рассчитанная зависимость скорости релаксации температуры электронов в кластере от начальной температуры и размера кластера. Качественное объяснение аномального спектра экспериментально наблюдаемой эмиссии электронов.

3. Теоретический анализ спектра флуктуаций давления в модели равновесной неидеальной плазме, получаемого в молекулярно-динамических расчетах. Объяснение роста вычислительных ошибок с ростом размера системы на основании особенностей её физических свойств.
4. Алгоритм молекулярно-динамического моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, в том числе, кластерной наноплазмы, получаемой при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов на наноразмерные мишени, адаптированный для выполнения на графических ускорителях. Величины ускорения расчетов на графических ускорителях по сравнению с универсальными процессорами в зависимости от числа частиц в системе.

## **Публикации**

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 22-х печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах из списка ВАК, индексируемых базой Web of Science и Scopus, 2 статьи в сборниках трудов конференций и 16 тезисов докладов.

## **Степень достоверности и апробация результатов**

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: XVII International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories, Rostock, Germany, September 8-13, 2013; 15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas, Almaty, August 30 – September 4, 2015; XXV IUPAP Conference on Computational Physics, Moscow, Russia, August 20-24, 2013; Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов НИУ ВШЭ 2014, 17-28 февраля 2014, Москва; International Conference Equations of State for Matter, Россия, Кабардино-Балкария. п. Эльбрус (2012, 2014, 2016); International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, Россия, Кабардино-Балкария, п. Эльбрус (2011, 2013, 2015); Всероссийская научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный (2009, 2010, 2011, 2012, 2014); Научно-координационная сессия "Исследования неидеальной плазмы Президиум РАН,



Москва (2014, 2016). International workshop "Complex systems of charged particles and their interaction with electromagnetic radiation"(2013, 2014, 2017).

### **Личный вклад автора**

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырех глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 94 страницы, из них 75 страницы текста, включая 20 рисунков. Библиография включает 76 наименований на 7-и страницах.

### **Содержание работы**

**Во Введении** приведены базовые сведения о наноплазме. На их основе показана актуальность диссертационной работы, аргументирован выбор целей и методов их достижения, показана научная новизна и практическая значимость полученных результатов. Представлены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** содержится краткий обзор основных работ, использованных в диссертации, а также, опираясь на них, дается краткое введение в физику рассматриваемых явлений, приводятся основные определения и базовые теоретические сведения. Литературный обзор содержит введение в метод молекулярной динамики и методы анализа результатов компьютерного моделирования.

**Вторая глава** посвящена созданию комплекса программ для моделирования неидеальной плазмы. По сути обсуждается основной инструмент, с помо-

щью которого будут получены все результаты, представленные в последующих главах. Основное внимание уделяется методам ускорения расчетов.

В последнее время получили широкое распространение вычислительные машины, содержащие графические ускорители (ГУ). При этом ГУ может использоваться собой математический сопроцессор, представляющий из себя совокупность большого количества простых вычислительных ядер (до 5120 на сегодняшний день), специализированных на математических операциях и объединенных общей памятью. Это обеспечивает высокую пиковую производительность ГУ. В то же время ГУ имеет достаточно сложную архитектуру, например, он обладает шестью разновидностями памяти, каждая из которых имеет свои преимущества и недостатки. Поэтому для программиста доступен широкий набор инструментов низкоуровневого управления операциями с памятью, это позволяет эффективно оптимизировать работу ГУ под конкретную задачу.

В работе показано, что для моделирования неидеальной наноплазмы эффективнее отказаться от традиционного для молекулярной динамики алгоритма подсчета сил, основанного на списке ближайших соседей и декомпозиции по пространству. Предлагаемая программа использует для распараллеливания на ГУ декомпозицию по частицам. Более того, показано, что для сравнительно небольших систем выгодно использовать сразу несколько вычислительных ядер для вычисления сил, действующих на одну частицу. На основе проведенного анализа для хранения интерполяционных таблиц потенциала и для таблиц, содержащих координаты частиц, выбрана текстурная память.

Программа интегрирована в свободно распространяемый пакет молекулярной динамики HOOMD. Проведено исследование скорости работы написанного комплекса программ. Алгоритм, разработанный для ГУ, позволил ускорить расчеты на два порядка по сравнению с одним ядром центрального процессора (см. рис. 1). Это позволило существенно увеличить размер систем и длины МД траекторий, доступные для моделирования. Программа позволяет моделировать системы размером до  $2 * 10^5$  частиц, в то время как однопроцессорные коды, существовавшие ранее, позволяли проводить расчеты в системах, размеры которых не превышали пару тысяч частиц [15].

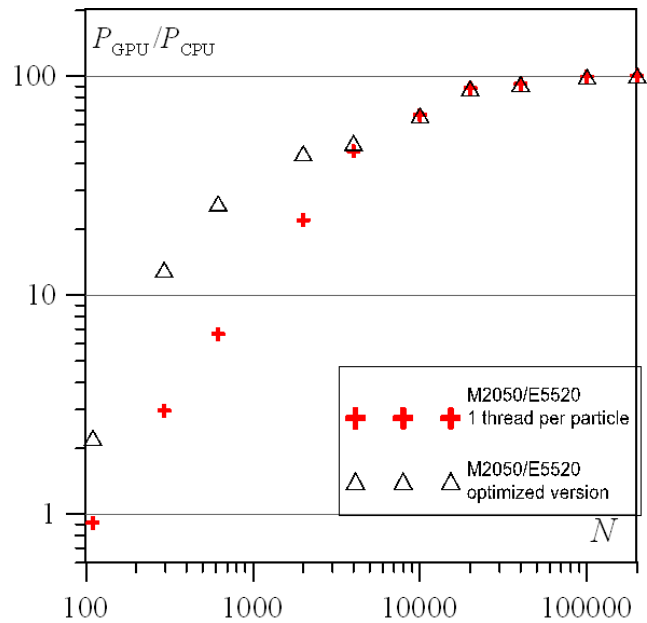


Рис. 1. Отношение производительности ЦПУ и ГУ для потенциала электрон-ионного взаимодействия в зависимости от числа частиц в системе. Крестики — однопоточная программа, треугольники — многопоточная.

**В третьей главе** рассматриваются исследования динамики электронов в ионизованном нанокластере в приближении неподвижных ионов. Проведено моделирование ионизованных кластеров различных температур, размеров и плотностей. По результатам моделирования рассчитана автокорреляционная функция тока и получены спектры собственных колебаний электронной подсистемы для всего кластера и его внутренней области (рис. 2). Согласно теории линейного отклика полученные спектры связаны с оптическими свойствами кластера.

Из анализа спектров получены частоты основных максимумов колебаний и декременты затуханий в зависимости от плотности и размера кластера. Показано, что частота колебаний  $M_i$  расщепляется на два максимума, основной из которых смещен в красную область спектра. Только при расчетах по внутренней области кластера наблюдаются колебания на плазменной частоте, причем их роль становится доминирующей с ростом кластера. Частота  $M_i$  наблюдается как для всего кластера так и для его внутренней области. С ростом размера кластера частоты основных максимумов приближаются к теоретическим значениям для частоты  $M_i$  и плазменной частоты. Это верно как для увеличения

размера при постоянной плотности, так и увеличения кластера при постоянном числе частиц (уменьшении плотности). Для самых больших из рассмотренных кластеров полученные значения мало отличаются от теоретических, что позволяет утверждать, что удалось промоделировать весь диапазон параметров, при которых наблюдаются заметные отклонения от теоретических значений, связанные с размером системы. Напомним, это стало возможным благодаря новому программному комплексу, который описан в предыдущем параграфе.

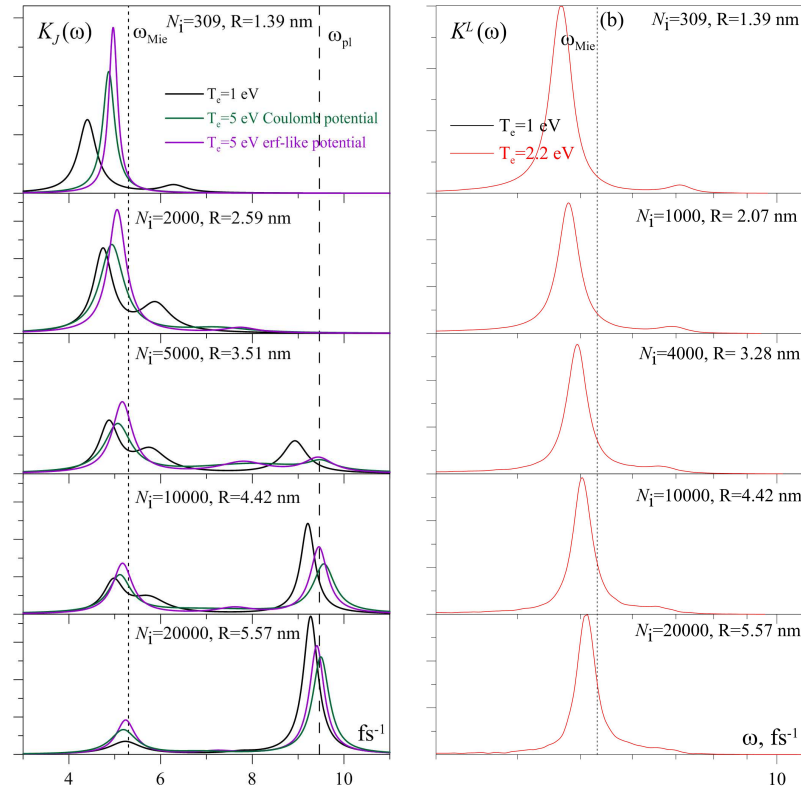


Рис. 2. Преобразование Фурье автокорреляционной функции тока (АФТ) для разных количеств ионов в кластере  $N_i$  (радиусов кластера  $R$ ) и различных температур, рассчитанное по внутренней сфере радиусом 2.7 нм (а) и по всей системе целиком (б). Штриховые линии обозначают частоту Ми  $\omega_{\text{Mie}}$  и плазменную частоту  $\omega_{\text{pl}}$ . Плотность ионов во всех случаях одинакова и равна  $n_i = 2.76 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

Для объяснения красного сдвига частоты Ми была получена аналитическая формула, связывающая профиль электронной плотности с частотой колебаний электронов. С помощью МД моделирования были вычислены профили электронной плотности в кластере и подставлены в указанную выше формулу. Наблюдается хорошее согласие между частотами, вычисленными обоими способами.

Также была исследована зависимость полученных результатов от вида потенциалов электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействия в МД модели.

**В четвертой главе** изучен процесс образования нескомпенсированного заряда  $Z$  в наноплазме, связанного с термоэмиссией электронов с поверхности кластера.

Ключевым различием между плазмой и наноплазмой является наличие в последней нескомпенсированного положительного заряда или, другими словами, отсутствие квазинейтральности. Четвертая глава посвящена теоретическому исследованию этого свойства. В отличие от предыдущей главы, где основные результаты получены из МД моделирования, а аналитические формулы лишь обобщают его результаты, в этой главе основным результатом является система уравнений, описывающая динамику заряда и температуры кластера, а МД служит лишь для проверки представленной теоретической модели.

В работе получена следующая система дифференциальных уравнений, описывающих ток электронной эмиссии из наноплазмы и уносимый им поток тепла:

$$\begin{cases} \frac{dZ}{dt} = \sqrt{\frac{8\pi kT}{m_e}} n_e R^2 \left(1 + \frac{U}{kT}\right) \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \\ \frac{d(kT)}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{1}{N_e} \frac{dZ}{dt} \left[\frac{1}{2}kT + \frac{U^2}{U+kT}\right], \\ U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{R}, \end{cases} \quad (1)$$

где  $T$  и  $n_e$  — температура и плотность электронов в наноплазме, а  $R$  и  $N_e$  — размер и полное число свободных электронов в кластере, соответственно. Эта система уравнений является основным результатом данной главы.

Для оценки качества полученной модели проведено сравнение её с результатами независимого компьютерного моделирования. Эмиссия электронов из нанокластеров детально исследовалась в работе [10]. К сожалению, задачу Коши для системы уравнений (1) не удастся решить аналитически, но она может быть с легкостью решена численно. Сравнение данных, полученных в работе [10] с численным решением системы уравнений (1) представлено на рис. 3. Различные линии соответствуют различным температурам (последовательно

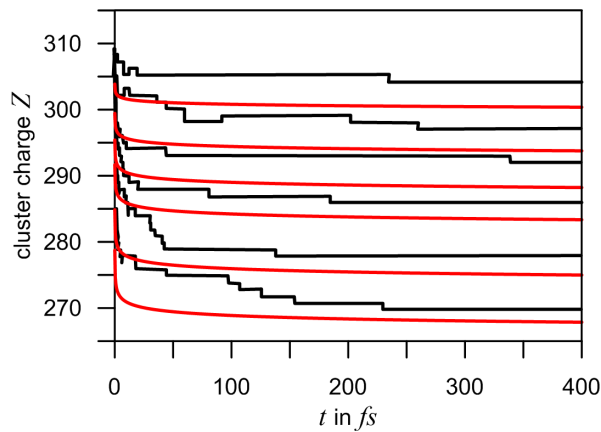


Рис. 3. Зависимость числа электронов внутри кластера  $\text{Na}_{309}$  от времени. Разными буквами обозначены кривые, которые соответствуют разным начальным температурам кластера. Красные линии рассчитаны по модели (1), черные линии — результаты МД моделирования, полученные в работе [10].

снизу вверх 0.5, 1, 2, 3, 4). Видно, что на больших временах данные молекулярной динамики и решение системы уравнений оказываются близки. На малых временах совпадение оказывается значительно хуже.

Для сравнения представленной модели с результатами экспериментов её нужно объединить с некоторой моделью расширения кластера. Мы будем претендовать лишь на качественное сравнение с экспериментом, поэтому добавим к нашей модели простейшее уравнение расширения кластера, взятое из работ [16, 17]. Данный подход игнорирует все явления, кроме электростатической силы взаимодействия нескомпенсированного заряда с поверхностью кластера. В этом случае можно получить объединенную систему дифференциальных уравнений, в которой два первых уравнения соответствуют модели эмиссии, а третье — расширению кластера.

Подставив в модель характерные параметры наноплазмы, достигаемые в эксперименте [18], получим, что средняя энергия электронов эмиссии окажется равной 1.3 эВ, а температура электронов внутри плазмы 0.3 эВ. В эксперименте, без указания источника, детектируются две группы электронов с температурами 0.2 эВ и 1.3 эВ, соответственно. Это позволяет предположить, что разделение электронов на две группы с разными температурами, наблюдаемое в эксперименте, может быть объяснено механизмом термоэлектронной эмиссии из наноплазмы.

**В пятой главе** флуктуации давления в неидеальной равновесной плазме исследовались методом МД. Теория линейного отклика гарантирует связь между флуктуациями величин в системе и откликом на внешнее воздействие [19, 20]. Масштаб флуктуаций изменяется как  $1/\sqrt{N}$ , где  $N$  число частиц в системе. Особенно возрастает роль флуктуаций с уменьшением системы до нанометрового масштаба.

Для расчетов была выбрана простейшая МД модель плазмы "Кулон с отсечкой". Плазма предварительно выводилась на равновесие с помощью термостата Ланжевена. Качество достижения равновесия контролировалось особенно тщательно с помощью многократных перезапусков новых траекторий с конца предыдущей и сравнения средних значений температуры, давления и потенциальной энергии. Вычисление давления основано на формуле вириала. В тексте диссертации дано основание её применимости в данной работе без каких либо поправок.

При исследовании флуктуаций с помощью численного метода важно разделять флуктуации, обусловленные физическими свойствами системы, и шум, внесенный вычислительными ошибками. Даны оценки трех традиционных для МД источников ошибок: ошибка вычисления сил, ошибка суммирования сил и ошибка интегрирования уравнений движения. Обнаружен новый источник ошибок. На основе физических свойств систем с дальнедействующими потенциалами аналитически показано, что потенциально источником вычислительных ошибок может становиться суммирование вириального выражения. В работе гарантируется, что флуктуации давления, обусловленные физическими свойствами системы, имеют как минимум три знака точности.

Исследованы системы в диапазоне значений параметра неидеальности от 0.1 до 2. Построены эмпирические спектры мощности флуктуаций давления в системе. Полученные спектры отличаются от спектров белого шума. Они могут быть аппроксимированы  $1/f^\alpha$  зависимостями с различными значениями  $\alpha$ . Характерный вид полученного спектра представлен на рисунке 4.  $1/f$  шум принято называть – фликкер шумом. Оказывается, это не первый случай, когда он обнаруживается в МД моделировании заряженных систем, однако все преды-

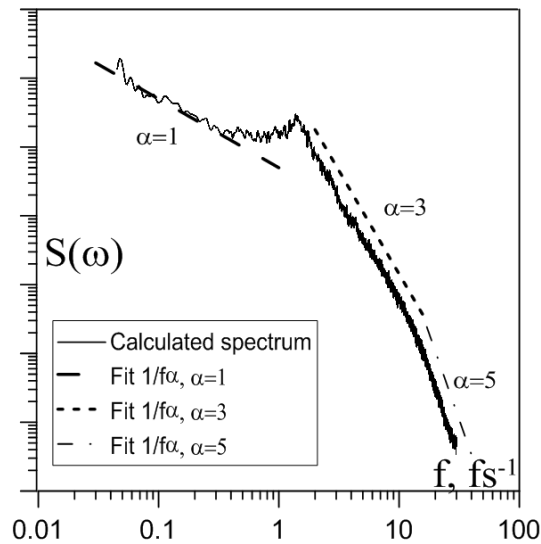


Рис. 4. Спектр мощности флуктуаций давления плазмы  $S(\omega)$ ,  $f = \omega/2\pi$  в системе с температурой  $T_e = T_i = 11600$  К и плотностью  $n_e = n_i = 5 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ . Сплошная линия — результат МД моделирования, пунктирные линии — аппроксимация полученных данных зависимостями типа  $1/f^\alpha$  с различными значениями  $\alpha$ .

дущие случаи относились к биологическим моделям и авторы не уделяли внимание термодинамическим следствиям полученных результатов. В этой работе продемонстрировано, что это свойство может наблюдаться в предельно простой кулоновской системе и не может быть объяснено близостью фазового перехода или какими-то биологическими особенностями системы. В работе обсуждаются причины, по которым данные примеры не противоречат общепринятой теории флуктуаций термодинамических величин, а дополняют её.

**В Заключение** перечислены основные результаты, приведены выводы.

1. Разработана программа молекулярно-динамического моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, адаптированная для выполнения на графических ускорителях Nvidia. В результате оптимизации достигнуто ускорение более чем в 100 раз при использовании одного графического ускорителя Nvidia M2050 по сравнению с ядром универсального процессора Intel Xenon E5520. Показано, что разработанная программа позволяет получить достоверные результаты при моделировании динамики электронов в системах с более чем  $2 \cdot 10^5$  частиц на одном ускорителе.
2. С помощью молекулярно-динамического моделирования неидеальной кла-



стерной наноплазмы рассчитаны частоты и декременты затухания основных мод электронных колебаний в зависимости от размера кластера, электронной плотности и температуры. Исследовано влияние потенциала межчастичного взаимодействия и пространственного расположения ионов в кластере на результаты моделирования. Получены распределения электронной плотности в ионизированном нанокластере. Предложена теоретическая модель, объясняющая сдвиг частоты колебаний Ми в красную область спектра на основе пространственной неоднородности плотности электронов.

3. Выведена система дифференциальных уравнений описывающих электронную эмиссию из наноплазмы. На их основании получена формула, описывающая изменение температуры электронов в результате эмиссии в зависимости от размера кластера и начальной температуры электронов. Проведено сравнение результатов теоретической модели с данными компьютерного моделирования. Предложено объяснение аномального спектра экспериментально наблюдаемой эмиссии электронов.
4. На основе молекулярно-динамического моделирования исследован спектр флуктуаций давления в модели равновесной неидеальной плазмы. Показано, что, несмотря на увеличения роли ошибок округления с ростом размера системы, негауссовский спектр флуктуаций давления является свойством модельной системы и не связан с численными ошибками. Полученный спектр флуктуаций давления при больших частотах имеет степенную зависимость от частоты, что соответствует определению фликкер-шума.

Материалы диссертации опубликованы в 22 печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах из списка ВАК, индексируемых базой Web of Science и Scopus, 2 статьи в сборниках трудов конференций и 22 тезисов докладов.

Список работ, индексируемых базой Web of Science и Scopus:

1. Morozov I. V., Kazennov A. M., Bystryi R. G., Norman G E., Pisarev V. V.,

- Stegailov V. V. Molecular dynamics simulations of the relaxation processes in the condensed matter on GPUs // *Computer Physics Communications*. 2011. Vol. 182. P. 1974–1978.
2. Bystryi R. G., Morozov I. V. Electronic oscillations in ionized sodium nanoclusters // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2015. Vol. 48, no. 1. P. 015401.
  3. Быстрый Р. Г. Лавриненко Я. С. Ланкин А. В. Морозов И. В. Норман, Г. Э. Сайтов И. М. Флуктуации давления в неидеальной невырожденной плазме // *Флуктуации давления в неидеальной невырожденной плазме*. 2014. том 52, №.4. С.475-482.
  4. Bystryi, R.G., Molecular dynamic study of pressure fluctuations spectrum in plasma // *Journal of Physics: Conference Series*. 2015. Vol. 653, no. 1, P. 012154

## Цитированная литература

1. Ostrikov K. K., Beg F., Ng A. Colloquium : Nanoplasmas generated by intense radiation // *Reviews of Modern Physics*. 2016. Vol. 88, no. 1. P. 011001.
2. Krainov V. P., Smirnov B. M., Smirnov M. B. Femtosecond excitation of cluster beams // *Physics-Uspekhi*. 2007. Vol. 50, no. 9. P. 907.
3. Fennel T., Meiwes-Broer K.-H., Tiggesbäumker J. et al. Laser-driven nonlinear cluster dynamics // *Rev. Mod. Phys.* 2010. Vol. 82, no. 2. P. 1793–1842.
4. Saalman U., Rost J.-M. *Ultrafast Dynamics in Extended Systems*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2015. P. 87–118.
5. Saalman U., Mikaberidze A., Rost J. M. Spatial correlations in finite samples revealed by coulomb explosion // *Physical review letters*. 2013. Vol. 110, no. 13. P. 133401.
6. Saalman U. Electron emission from laser-irradiated atomic clusters // *Laser Physics*. 2009. Vol. 19, no. 2. P. 202–207.

7. Mikaberidze A., Saalman U., Rost J. M. Laser-driven nanoplasmas in doped helium droplets: Local ignition and anisotropic growth // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, no. 12. P. 128102.
8. Saalman U. Cluster nanoplasmas in strong FLASH pulses: formation, excitation and relaxation // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2010. Vol. 43. P. 194012.
9. Bostedt C., Adolph M., Eremina E. et al. Clusters in intense FLASH pulses: ultrafast ionization dynamics and electron emission studied with spectroscopic and scattering techniques // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2010. Vol. 43. P. 194011.
10. Reinholz H., Broda I. A. M., Raitza T., Röpke G. Size Dependence of Minimum Charge of Excited Nano-Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* 2013. Vol. 53, no. 4-5. P. 263–269.
11. Tachibana T., Jurek Z., Fukuzawa H. et al. Nanoplasma Formation by High Intensity Hard X-rays // *Scientific reports*. 2015. Vol. 5.
12. Shao Y., Ditmire T., Tisch J. et al. Multi-keV Electron Generation in the Interaction of Intense Laser Pulses with Xe Clusters // *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 77, no. 16. P. 3343–3346.
13. Ditmire T., Smith R., Tisch J., Hutchinson M. High Intensity Laser Absorption by Gases of Atomic Clusters // *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78, no. 16. P. 3121–3124.
14. Ditmire T., Springate E., Tisch J. et al. Explosion of atomic clusters heated by high-intensity femtosecond laser pulses // *Physical Review A*. 1998. Vol. 57, no. 1. P. 369–382.
15. Raitza T., Reinholz H., Röpke G. et al. Laser excited expanding small clusters: Single time distribution functions // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. Vol. 49. P. 496–506.
16. Smirnov M. Ion spectrum under excitation of a cluster beam by a laser pulse // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2014. Vol. 119, no. 3. P. 367–374.
17. Krainov V. P., Smirnov B. M., Smirnov M. B. Femtosecond excitation of cluster

- beams // Physics-Uspekhi. 2007. Vol. 50, no. 9. P. 907.
18. Kumarappan V., Krishnamurthy M., Mathur D. Two-dimensional effects in the hydrodynamic expansion of xenon clusters under intense laser irradiation // [Physical Review A](#). 2002. Vol. 66. P. 1–4.
19. Kubo R., Toda M., Hashitsume N. Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics. Springer Science & Business Media, 2012. Vol. 31.
20. Lifschitz E., Pitajewski L. Physical kinetics // Textbook of theoretical physics. 10. 1983.

Быстрый Роман Григорьевич

## АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук на тему:

Динамика электронов в неидеальной кластерной наноплазме

---

Подписано в печать

Формат 60 × 84/16

Печать офсетная

Усл.-изд.л.

Усл.-печ.л.

Тираж 100 экз.

Заказ №

Бесплатно

---

ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2.