РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Расчёты скорости обмена энергией между электронами и ионами на основе модели среднего атома Старретта и Саумона

А.А. Овечкин, Н.А. Смирнов, П.А. Лобода, А.Л. Фальков

РФЯЦ – ВНИИТФ им. акад. Е.И. Забабахина

Релаксация импульса и энергии электронов в твёрдом теле и в жидкости/плазме

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Электропроводность, теплопроводность

Выравнивание температуры в неравновесно нагретом веществе

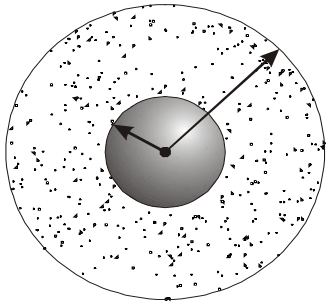
$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = -G\left(T_e - T_i\right)$$

коэффициент электрон-фононного/электрон-ионного обмена

- Взаимодействие лазерного излучения с веществом: $T_e > T_i$
- Термоядерный синтез: $T_i > T_e$

Модели среднего атома

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



- Приближение сферической симметрии
- Приближение самосогласованного поля

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r)\right)\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\,\psi_i(\mathbf{r})$$

$$V(r) = V_{\mathrm{el}}(r) + V_{\mathrm{xc}}(r)$$

$$\nabla^2 V_{\mathrm{el}}(r) = -4\pi\,e^2\left(n_e(r) - n_i(r)\right)$$

$$n_e(r) = \sum_i f\left(\varepsilon_i\right)\left|\psi_i(\mathbf{r})\right|^2$$

Модели применимы в широком диапазоне T и ρ, охватывающем состояния горячего и тёплого плотного вещества

- Статистика Ферми-Дирака

$$f(\varepsilon) = \left\{1 + \exp\left[\beta_e\left(\varepsilon - \mu_e\right)\right]\right\}^{-1}, \quad \beta_e = 1/T_e$$

Коэффициент электрон-фононного обмена в твёрдом теле. Обобщённый метод Аллена [1,2]

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

$T_e > \theta_D$ (θ_D – температура Дебая) → рассеяние электронов можно считать упругим

$T_i > \theta_D$

$$G = \pi \hbar \beta_e n_i \int P^{(1)}(\varepsilon) f(\varepsilon, \mu_e) [1 - f(\varepsilon, \mu_e)] d\varepsilon$$

$$P^{(1)}(\varepsilon) = \frac{4}{\hbar} \sum_{\mathbf{k},i;\mathbf{k}',j;\nu} \omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k},i} - \varepsilon) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}',j} - \varepsilon) \left| \mathcal{G}^{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu}_{\mathbf{k},i;\mathbf{k}',j} \right|^2$$

$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ – приращение волнового вектора электрона, n_i – средняя концентрация ионов

$\mathbf{q}(\mathbf{K}) = \mathbf{K} - \mathbf{g}$ – волновой вектор фонона, приведённый к 1-й зоне Бриллюэна

$\mathbf{g}$ – вектор обратной решётки

ν, $\omega_{\mathbf{q},\nu}$ – поляризация и частота фонона

$\mathcal{G}^{\mathbf{q},\nu}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия

1. P.B. Allen. Phys. Rev. Lett. 59, 1460 – 1463 (1987).
2. N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 101, 094103 (2020).

Коэффициент электрон-фононного обмена в твёрдом теле. Обобщённый метод Аллена [1,2]

РФЯЦ-ВНИИТФ РОСАТОМ

Маффин-тин приближение

$$V_e(r) = \begin{cases} V(|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|) & \text{при } |\mathbf{r}-\mathbf{R}_i| \leqslant a, \\ 0 \text{ при } \min\limits_j |\mathbf{r}-\mathbf{R}_j| > a. \end{cases}$$

В случае одного рассеивающего центра [3]

$$P^{(1)}(\varepsilon) = \frac{4 m_e^2 \varepsilon^2 \sigma_{\rm tr}^{(1)}(\varepsilon)}{\pi^3 \hbar^4 M_i}$$

транспортное сечение e-i рассеяния в сферически-симметричном потенциале V(r)

$$\sigma_{\rm tr}^{(1)}(\varepsilon) = \int d\Omega\,(1-\cos\theta)\frac{d\sigma(\varepsilon,\theta)}{d\Omega} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_e\,\varepsilon}\sum_{l=0}^{\infty}\sin^2\left(\delta_{l+1}(\varepsilon)-\delta_l(\varepsilon)\right)$$

$$\boxed{G = 3\bar{Z}\,n_i\,m_e\,\nu_{ei}^{(1)}/M_i} \qquad (1)$$

$$\nu_{ei}^{(1)} = \frac{4 m_e \beta_e}{3\pi^2\hbar^3\bar{Z}}\int_0^{\infty}\varepsilon^2 f(\varepsilon)\left[1-f(\varepsilon)\right]\sigma_{\rm tr}^{(1)}(\varepsilon)d\varepsilon$$

$$\bar{Z} = \frac{\sqrt{2}\,m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3\beta_e^{3/2}\,n_i}I_{1/2}(\beta_e\mu_e), \quad I_k(x) = \int_0^{\infty}\frac{y^k\,dy}{1+\exp(y-x)}$$

средний заряд иона

Формула (1)

- может использоваться для расчётов коэффициента <u>электрон-ионного</u> обмена в плазме на основе моделей среднего атома

- была ранее получена при помощи

- **соотношения Кубо [4]**
- **квантового кинетического уравнения Больцмана [5]**

1. P.B. Allen. Phys. Rev. Lett. 59, 1460 – 1463 (1987).
2. N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 101, 094103 (2020).
3. G.D. Gaspari, B.L. Gyorffy. Phys. Rev. Lett. 28, 801 – 805 (1972).
4. J. Daligault, J. Simoni. Phys. Rev. E 100, 043201 (2019).
5. S. Rightley, S.D. Baalrud. Phys. Rev. E 103, 063206 (2021).

Коэффициент <u>электрон-фононного</u> обмена в твёрдом теле (обобщённый метод Аллена) → **Приближение сферической симметрии** → **Коэффициент <u>электрон-ионного</u> обмена в плазме на основе модели среднего атома**

Можно получить согласованные широкодиапазонные зависимости $G(\rho,T_e,T_i)$, используя результаты твердотельных расчётов при низких T_e, T_i (до нескольких эВ) и расчётов по моделям среднего атома при более высоких T_e, T_i

Удельное электрическое сопротивление в твёрдом теле. Метод Аллена для решения уравнения Больцмана [1,2]

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

$T_e > \theta_D$ → рассеяние электронов можно считать упругим

$$\eta = \frac{3\pi\,\hbar\,M_i\,\beta_e}{e^2\,m_e^2\,n_i}\int d\varepsilon\,\frac{f(\varepsilon)\,[1-f(\varepsilon)]\,P^{(2)}(\varepsilon)}{[w(\varepsilon)\,v^2(\varepsilon)]^2}$$

$$P^{(2)}(\varepsilon) = \frac{4}{\hbar}\sum_{\mathbf{k},i;\mathbf{k}',j;\nu}\omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu}\,\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k},i}-\varepsilon\right)\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}',j}-\varepsilon\right)\left|\mathcal{G}^{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu}_{\mathbf{k},i;\mathbf{k}',j}\right|^2 S^{(1)}_{ii}(K)$$

$$S^{(1)}_{ii}(K) = \frac{\hbar\,K^2\left[2n_B\left(\beta_i\,\hbar\,\omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu}\right)+1\right]}{2M_i\,\omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu}} \approx \frac{\hbar}{2M_i}\sum_{\nu'}\frac{(\mathbf{K}\,\mathbf{e}_{\nu'})^2}{\omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu'}}\left[2n_B\left(\beta_i\,\hbar\,\omega_{\mathbf{q}(\mathbf{K}),\nu'}\right)+1\right]$$

$n_B(x) = [\exp(x)-1]^{-1}$, $\beta_i = 1/T_i$, $w(\varepsilon)$ – плотность состояний электронов

$S^{(1)}_{ii}(K)$ – эффективный ион-ионный структурный фактор (без учёта слагаемого, отвечающего брэгговскому рассеянию), в однофононном приближении

1. P.B. Allen. Phys. Rev. B 17, 3725 – 3734 (1978).
2. N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 106, 024109 (2022).
3. D.A. Baiko, A.D. Kaminker, A.Y. Potekhin, D.G. Yakovlev. Phys. Rev. Lett. 81, 5556 – 5559 (1998).

Удельное электрическое сопротивление в твёрдом теле. Метод Аллена для решения уравнения Больцмана [1,2]

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

- Приближение однородного газа свободных электронов

$$w(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}\, m_e^{3/2} / \left(\pi^2\, \hbar^3\, n_i\right), \quad v(\varepsilon) = \sqrt{2 m_e\, \varepsilon}$$

- Случай сильного вырождения электронов

$$T_e \lesssim E_F \Rightarrow \varepsilon \approx \mu_e, \quad w(\varepsilon)\, v^2(\varepsilon) \approx 3\bar{Z}/m_e$$

- Маффин-тин приближение + один рассеивающий центр [3]

$P^{(2)}(\varepsilon)$ отличается от $P^{(1)}(\varepsilon)$ в выражении для G только наличием под знаком суммы множителя $S^{\wedge(1)}(K)$

$$P^{(2)}(\varepsilon) = \frac{4 m_e^2\, \varepsilon^2\, \sigma_{\mathrm{tr}}^{(2)}(\varepsilon)}{\pi^3\, \hbar^4\, M_i}, \quad \sigma_{\mathrm{tr}}^{(2)}(\varepsilon) = \int d\Omega\, (1 - \cos\theta)\, S_{ii}^{(1)}(K)\, \frac{d\sigma(\varepsilon, \theta)}{d\Omega}, \quad K = 2\sqrt{m_e\, \varepsilon\, (1 - \cos\theta)}/\hbar$$

$$\boxed{\eta = \frac{m_e\, \nu_{ei}^{(2)}}{\bar{Z}\, n_i\, e^2}, \quad \nu_{ei}^{(2)} = \frac{4 m_e\, \beta_e}{3\pi^2\, \hbar^3\, \bar{Z}} \int_0^\infty \varepsilon^2\, f(\varepsilon)\, [1 - f(\varepsilon)]\, \sigma_{\mathrm{tr}}^{(2)}(\varepsilon)\, d\varepsilon}$$

Обобщённая формула Займана (используется в расчётах по моделям среднего атома [4])

1. P.B. Allen. Phys. Rev. B 17, 3725 – 3734 (1978).
2. N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 106, 024109 (2022).
3. 3. G.D. Gaspari, B.L. Gyorffy. Phys. Rev. Lett. 28, 801 – 805 (1972).
4. P.A. Sterne, S.B. Hansen, B.G. Wilson, W.A. Isaacs. HEDP 3, 278 – 282 (2007).

Методы расчёта коэффициента электрон-фононного обмена и электрического сопротивления в твёрдом теле

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Приближение сферической симметрии

Методы расчёта коэффициента электрон-ионного обмена и электрического сопротивления в плазме на основе модели среднего атома

$$G = 3\bar{Z}\, n_i\, m_e\, \nu_{ei}^{(1)} / M_i$$

$$\eta = m_e\, \nu_{ei}^{(2)} / \left(\bar{Z}\, n_i\, e^2\right)$$

$$\nu_{ei}^{(1,2)} = \frac{4 m_e\, \beta_e}{3\pi^2\, \hbar^3\, \bar{Z}} \int\limits_0^\infty \varepsilon^2\, f(\varepsilon)\, [1 - f(\varepsilon)]\, \sigma_{\mathrm{tr}}^{(1,2)}(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$$\sigma_{\mathrm{tr}}^{(1)}(\varepsilon) = \int d\Omega\, (1 - \cos\theta)\, \frac{d\sigma(\varepsilon,\theta)}{d\Omega}$$

$$\sigma_{\mathrm{tr}}^{(2)}(\varepsilon) = \int d\Omega\, (1 - \cos\theta)\, S(K)\, \frac{d\sigma(\varepsilon,\theta)}{d\Omega}$$

Нет ионного структурного фактора
(описывает передачу энергии, не связанную с макроскопическим потоком частиц; направление движения рассеянного электрона не играет роли)

Есть ионный структурный фактор
(описывает релаксацию импульса, не связанную с макроскопическим потоком электронов; направление движения рассеянного электрона играет роль)

Двухтемпературная модель среднего атома Старретта и Саумона [1,2]

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

- Вещество – совокупность псевдоатомов
- Псевдоатом: ион (центральное ядро + связанные электроны) и экранирующие его свободные электроны

Рассеивающий потенциал

Потенциал $V^{PA}(r)$, создаваемый отдельным псевдоатомом

- Слабо зависит от T_i, что согласуется с обобщённым формализмом Аллена для твёрдого тела и с диэлектрическим формализмом Далиго и Димонте [3]

Потенциал $V^{MF}(r)$, создаваемый совокупностью всех псевдоатомов [4]

- Более чувствителен к T_i, чем $V^{PA}(r)$

Какой потенциал правильнее использовать?

1. C.E. Starrett, D. Saumon. HEDP 10, 35 – 42 (2014).
2. Z.A. Johnson, N. Shaffer, M.S. Murillo. arXiv:2411.02363v1 (2024).
3. J. Daligault, G. Dimonte. Phys. Rev. E 79, 056403 (2009).
4. C.E. Starrett. HEDP 25, 8 – 14 (2017).

Диэлектрический формализм Далиго и Димонте для коэффициента электрон-ионного обмена [1]

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

$$G = 3\langle Z\rangle\, n_i\, m_e\, \nu_{ei}/M_i, \quad \nu_{ei} = 4\sqrt{2\pi}\,\langle Z\rangle^2\, e^4\, n_i\, \ln\Lambda/\left(3\sqrt{m_e}\,T_e^{3/2}\right)$$

$$\ln\Lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2\langle Z\rangle\, I_{1/2}\left(\beta_e\,\mu_e\right)} \int\limits_0^\infty dk\, \frac{\tilde{n}_e^{\mathrm{scr}}(k)}{\varkappa^2\left[k^2 + \varkappa^2\left(1 - G_{ee}(k)\right)\right]} f\left(\frac{\hbar^2\, k^2}{8m_e}\right)$$

$\tilde{n}_e^{\mathrm{scr}}(k) = \dfrac{4\pi}{k} \displaystyle\int\limits_0^\infty r\, n_e^{\mathrm{scr}}(r)\, \sin(k\, r)\, dr,$ $\quad n_e^{\mathrm{scr}}(r)$ – плотность свободных электронов псевдоатома

$G_{ee}(k)$ – локальная электрон-электронная полевая поправка [2]

$\varkappa^2 = -4\pi\, e^2\, \chi_e^0(k), \quad \chi_e^0(k)$ – статическая функция отклика невзаимодействующих электронов [3]

$\langle Z\rangle = 4\pi \displaystyle\int\limits_0^\infty n_e^{\mathrm{scr}}(r)\, r^2\, dr$ – средний заряд иона (при высоких T_e $\langle Z\rangle \approx \bar{Z}$)

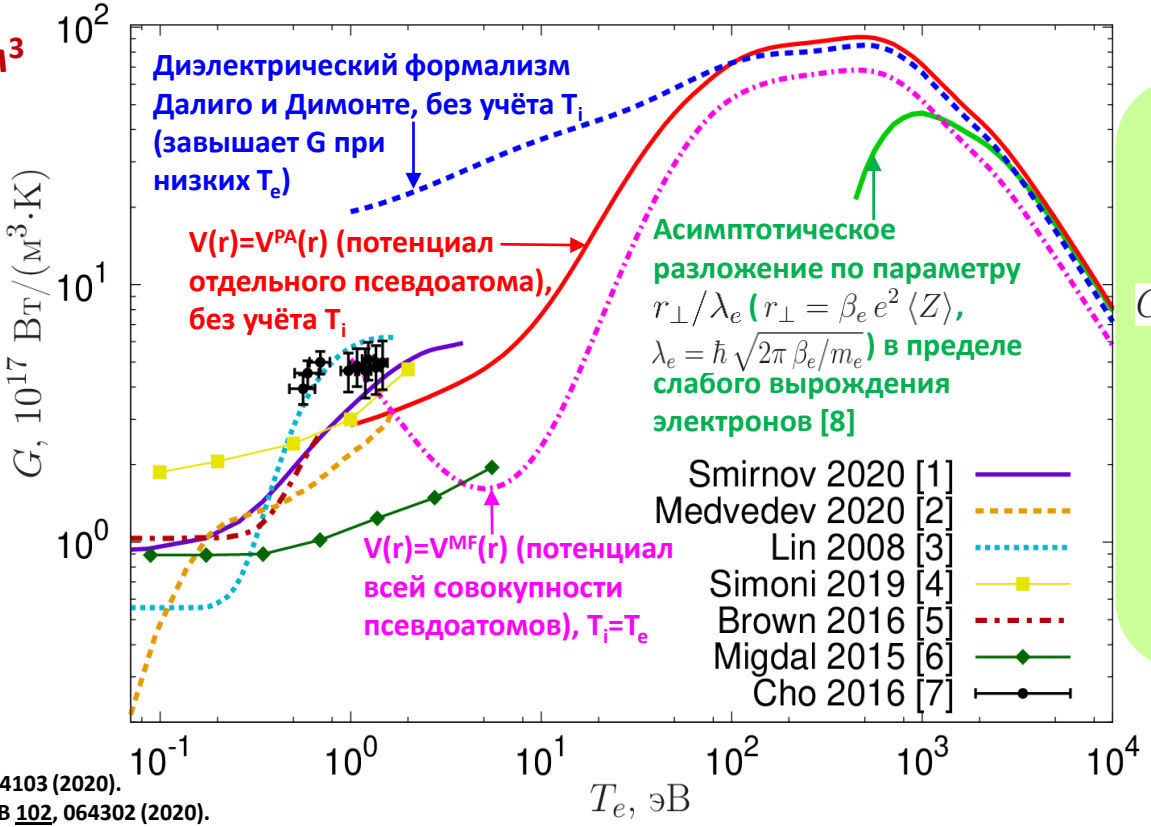
Модель Старретта и Саумона обеспечивает все необходимые входные величины

1. J. Daligault, G. Dimonte. Phys. Rev. E 79, 056403 (2009).
2. S. Ichimaru, K. Utsumi. Phys. Rev. B 24, 7385 – 7388 (1981).
3. G. Chabrier. J. Phys. France 51, 1607 – 1632 (1990).

Коэффициент электрон-ионного/электрон-фононного обмена в меди

ρ=8.92 г/см³

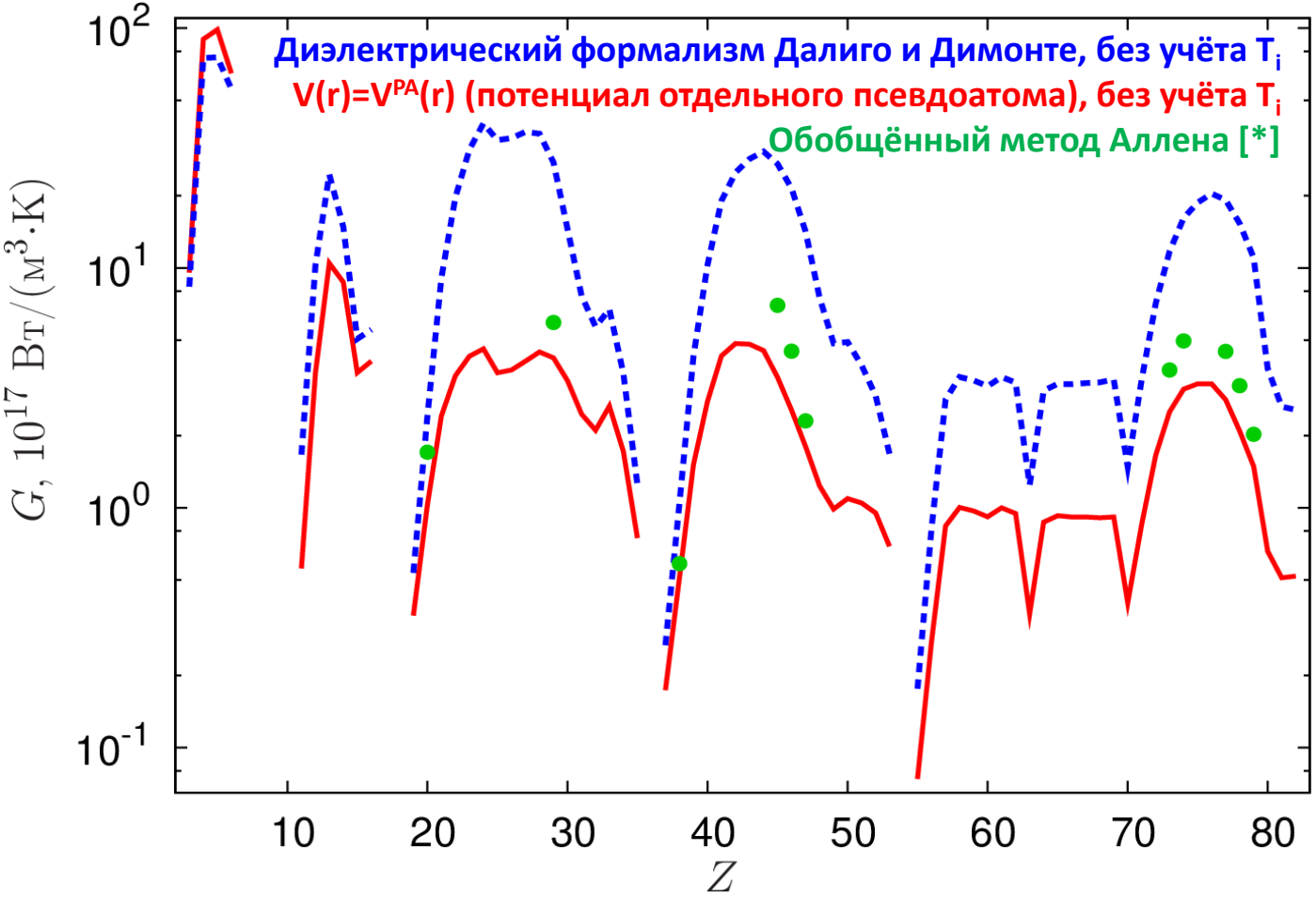
Сравнение с результатами многоцентровых расчётов не позволяет однозначно отдать предпочтение $V^{PA}(r)$ или $V^{MF}(r)$



$V^{PA}(r)$ обеспечивает более точную асимптотику $G \propto \ln r_{De}$ (r_{De} – электронный дебаевский радиус), чем $V^{MF}(r)$ ($G \propto \ln r_D$, r_D – полный дебаевский радиус)

1. N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 101, 094103 (2020).
2. N. Medvedev, I. Milov. Phys. Rev. B 102, 064302 (2020).
3. Z. Lin, L.V. Zhigilei, V. Celli. Phys. Rev. B 77, 075133 (2008).
4. J. Simoni, J. Daligault. Phys. Rev. Lett. 122, 205001 (2019).
5. A.M. Brown, R. Sundararaman, P. Narang, W.A. Goddard, H.A. Atwater. Phys. Rev. B 94, 075120 (2016).
6. K.P. Migdal, D.K. Il'nitsky, Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov. J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012086 (2015).
7. B.I. Cho, T. Ogitsu, K. Engelhorn *et al*. Sci. Rep. 6, 18843 (2016).
8. L.S. Brown, R.L. Singleton. Phys. Rev. E 76, 066404 (2007).

Зависимость G(Z) при $\rho=\rho_0$, T_e=45 кК (3.88 эВ)



[*] N.A. Smirnov. Phys. Rev. B 101, 094103 (2020), Phys. Rev. B 111, 014107 (2025) + данная работа.

Открытые вопросы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

- Какой рассеивающий потенциал следует использовать в расчётах коэффициента электрон-ионного обмена и электропроводности/теплопроводности на основе моделей среднего атома?
- Как выйти за рамки приближения однородного электронного газа и/или как правильно определить средний заряд иона в формуле Займана?
- Качественная и количественная зависимость коэффициента электрон-ионного/электрон-фононного обмена от температуры ионов.

Выводы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

• Показано, что разработанные Алленом методы расчёта коэффициента электрон-фононного обмена и электропроводности в частном случае сферического электронного потенциала согласуются с методами, которые были развиты применительно к моделям среднего атома. При этом транспортное сечение рассеяния электрона в потенциале среднего атома при расчёте электропроводности должно вычисляться с учётом ионного структурного фактора, а при расчёте коэффициента электрон-ионного обмена – без учёта структурного фактора.

Выводы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

• Применительно к расчётам коэффициента электрон-ионного обмена протестированы два способа вычисления рассеивающего потенциала на основе модели среднего атома Старретта и Саумона. Показано, что оба способа дают в целом близкую степень согласия с результатами многоцентровых расчётов при температурах электронов порядка нескольких эВ, но при этом расчёт сечения рассеяния в потенциала отдельного псевдоатома обеспечивает более точную высокотемпературную асимптотику по сравнению с потенциалом, создаваемым всей совокупностью псевдоатомов. Альтернативный способ расчёта коэффициента электрон-ионного обмена при помощи диэлектрического формализма Далиго и Димонте, адаптированного к модели Старретта и Саумона, систематически завышает результаты при T_e<10 – 100 эВ.