МРНТИ 29.27.03

Ю.В. Архипов[1], А. Аскарулы[1], А.Б. Ашикбаева[1], Д.Ю. Дубовцев[1], Н. Мурсал[1], С.А. Сызганбаева[1], И.М. Ткаченко[2]

[1]*КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*;

[2]*Валенсийский политехнический университет, Валенсия, Испания*

ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ ФАКТОРЫ МОДЕЛЬНОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

Аннотация. В работе рассчитаны динамические структурные факторы (ДСФ) модельной двухкомпонентной водородной плазмы, которые хорошо согласуются как количественно, так и качественно с данными численных экспериментов других исследователей [1,2]. Эти характеристики позволяют исследовать как дисперсию волн, распространяющихся в плотной неидеальной плазме, так и их диссипацию [3]. Авторами использован метод моментов, не требующий использования малых параметров для решения задач. Математические основы этого метода позволяют использовать его для различных эффективных потенциаловмежчастичного взаимодействия в равновесной плазме. Особенностью данного подхода является необходимость знания выражения для так называемой параметр-функции Неванлинны, которая входит в расчетные соотношения. В данной работе в качестве этой величины использовано соотношение, предложенное ранее в [4].

Важным достоинством данного подходаявляется возможность определения динамических характеристик системы заряженных частиц по рассчитанным статическим. Последние найдены из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепномприближении с помощью потенциалов указанных в работе.

Ключевые слова: статический структурный фактор, динамический структурный фактор, метод моментов, формула Неванлинны, параметр-функция Неванлинны, функция потерь,флуктуационно-диссипативная теорема.

Введение

Экспериментальные исследования неидеальной плазмы очень затруднительны из-за трудностей с созданием и диагностикой такой кулоновской системы. Поэтому современные исследования, в частности динамических характеристик неидеальной плазмы, проводятся путем численного моделирования [2]. При этом, в основном, применяются классические методы численного моделирования такие как, например, метод молекулярной динамики, где квантовые свойства системы учитываются путем введения эффективных потенциалов взаимодействия между частицами.

В данной работе используются три вида потенциалов:

1) потенциалДойча, в котором учитывается квантово–механические эффекты дифракции

$$\Phi_{ab}\left(r\right)=\frac{e_a e_b}{r}\left[1-\exp\left(-\frac{r}{\lambda_{ab}}\right)\right], \qquad (1)$$

2) модифицированный потенциал Кулона I, определенный с помощью функции ошибок

$$\Phi_{ab}(r)=\frac{e_a e_b}{r}erf\left(\frac{r}{2\lambda_{ab}}\right), \qquad (2)$$

3) модифицированный потенциал Кулона II, не обращающийся в бесконечность при $r\to 0$

$$\Phi_{ab}(r)=\frac{e_a e_b}{\sqrt{r^2+\lambda_{ab}^2}}. \qquad (3)$$

Здесь e_a, e_b – заряды частиц сорта a и b соответственно, находящихся на расстоянии r друг от друга, $\lambda_{ab}=\sqrt{\dfrac{\beta\hbar^2}{2\pi\mu_{ab}}}$ - длина волны де Бройля, $\mu_{ab}=\dfrac{m_a m_b}{m_a+m_b}$ - приведенная масса.

Одна из главных целей работы - получить и сравнить динамические характеристики двухкомпонентной плазмы с данными компьютерного моделирования других авторов [2]. Для расчетов ДСФ использован метод моментов, позволяющий проводить вычисления в плотных непертубативных системах заряженных частиц.

Динамический структурный фактор «заряд-заряд» в классическом приближении напрямую связан с обратной продольной диэлектрической функцией плазмы посредством флуктуационно-диссипативной теоремы как:

$$S_{zz}(k,\omega)=\frac{L(k,\omega)}{\pi\beta\phi(k)b(\beta\hbar\omega)}, \quad (4)$$

где $\beta^{-1}=k_BT$ - температура системы в энергетических единицах, k_B и $\hbar$ - постоянные Больцмана и Планка соответственно, $\phi(k)=4\pi e^2/k^2$ - Фурье-образ кулоновского потенциала, функция $b(x)=(1-\exp(-x))/x$ положительна.

С помощью формулы Неванлинны, известной в классической теории моментов [3,4], выразим функцию отклика

$$\varepsilon^{-1}(k,z)=1-C_0(k)-\frac{E_3(k,z)+Q(k,z)E_2(k,z)}{D_3(k,z)+Q(k,z)D_2(k,z)}, \quad (5)$$

через функцию класса Неванлинны $Q=Q(k,z)$.

После ряда преобразований связанных с полиномами $D_n(k,z)$ и $E_n(k,z)$ см. [5, 6], получается выражение для динамического структурного фактора:

$$S_{zz}(k,\omega)=\frac{\omega_p^2}{\pi\beta\phi(k)b(\beta\hbar\omega)}\times\frac{\left[\omega_2^2(k)-\omega_1^2(k)\right]\operatorname{Im}Q(k)}{\left|\omega\left(\omega^2-\omega_2^2(k)\right)+Q(k)\left(\omega^2-\omega_1^2(k)\right)\right|^2}. \quad (6)$$

здесь

$$\omega_1^2=C_2(k)/C_0(k),$$
$$\omega_2^2=C_4(k)/C_2(k),$$

ифункция класса Неванлинны

$$Q(k)=\frac{i}{\sqrt{2}}\frac{\omega_2^2(k)}{\omega_1(k)}, \quad (7)$$

полученная в [4].

Выражения $C_\nu(k)$ определены как степенные частотные моменты четной функции потерь (правила сумм):

$$C_\nu(k)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega^{\nu-1}\operatorname{Im}\varepsilon^{-1}(k,\omega)d\omega. \quad (8)$$

Вычисление их позволяет записать выражения в виде

$$C_0(k)=\frac{k_{De}^2}{k^2}S_{zz}(k),\ k_{De}^2=4\pi n_e e^2\beta,$$
$$C_2=\omega_p^2, \quad (9)$$
$$C_4(k)=\omega_p^4(\zeta_{ab}(k)+K(k)+U(k)+H).$$

Здесь

$$K(k)=\frac{\langle v_e\rangle^2k^2}{\omega_p^2}+\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2\frac{k^2}{\omega_p^2},$$

$$H=\omega_p^4\left(-\frac{1}{6\pi^2n_e}\int_0^\infty q^2S_{ei}(q)\zeta_{ei}(q)dq\right),$$

$$U(k)=\omega_p^4\left(\frac{1}{16\pi^2n_e}\int_0^\infty q^2(S_{ee}(q)-1)\left(Z_{ee}(k,q)-\frac{8\zeta_{ee}(q)}{3}\right)dq\right),$$

$$Z_{ee}(k,q)=\int_{q-k}^{q+k}\zeta_{ee}(p)\left(q^2-k^2-p^2\right)^2\frac{dp}{qk^3p}.$$

Здесь $S_{zz}(k)=Z_e^2S_{ee}(k)+Z_i^2S_{ii}(k)-2Z_iS_{ei}(k)$, где $Z_e=-1$, а $S_{ab}(k)$ - статические структурные факторы,которые могут быть найдены, например, из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении [7], $\Phi_{ab}(q)=\frac{4\pi e^2}{q^2}\zeta_{ab}(q)$ - Фурье-образ эффективного потенциала, $\left\langle v_e^2\right\rangle=3\frac{\theta}{m\beta}F_{3/2}(\eta)$ – средний квадрат тепловой скорости электронов, m – их масса, F_ν – интеграл Ферми, который определяется как

$$F_\nu(\eta)=\int_0^\infty\frac{x^\nu}{\exp(x-\eta)+1}dx,$$

где $\eta=\beta\mu$ - безразмерный химический потенциал системы, он определяется из условия нормировки:

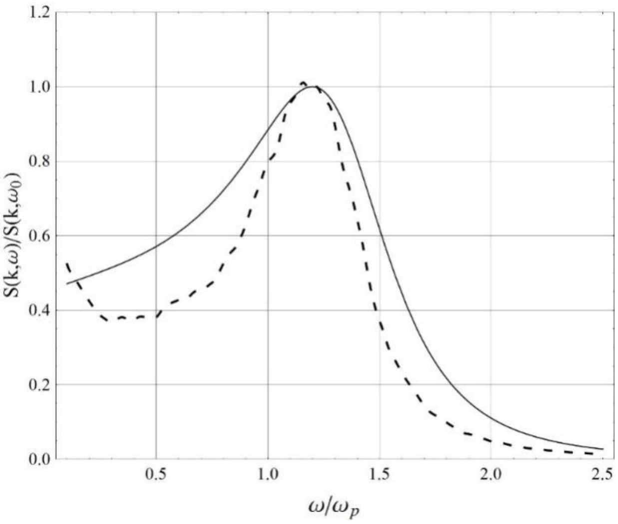
$$F_{1/2}(\eta)=\frac{2}{3}\theta^{-3/2}.$$

Функция – параметр $Q(k,\omega)$ влияет как на положение, так и на ширину ленгмюровской линии в спектре коллективных возбуждений системы, что проявляется в соответствующей функции потерь или динамическом структурном факторе «заряд - заряд».

Выражение для динамического структурного фактора (6) с функцией параметром

Неванлинны определенной (7), ведет к правильному статическому значению динамического структурного фактора и удовлетворяет всем трем правилам сумм (9).

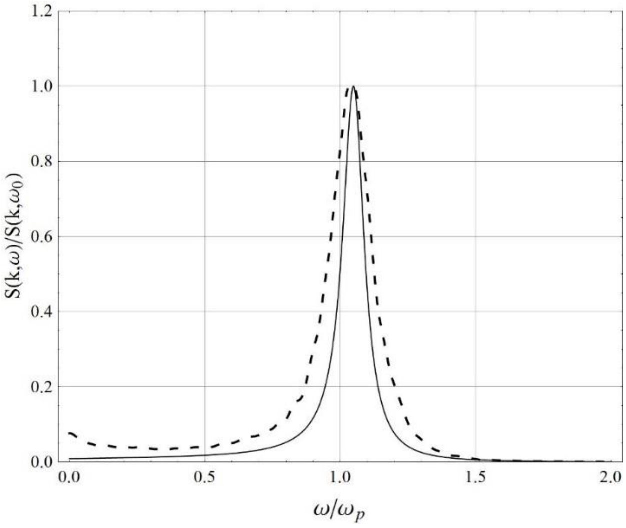
Ниже на рисунках 1-3 показаны приведенные к безразмерному виду ДСФ $S(k,\omega)/S(k,\omega_0)$ (ω_0-максимальное значение) в зависимости от безразмерной частоты ω/ω_p при фиксированных значениях безразмерного волнового числа $q = ka$ и при различных значениях параметра связи Г и плотности плазмы r_s .



Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (1), штриховая линия соответствует результатам моделирования [2]. $G = 1, r_s = 3.98, ka = 0.7795$.

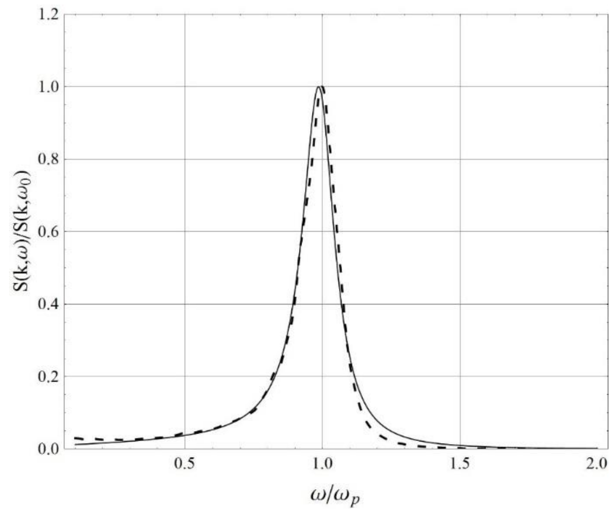
Рисунок 1 – Динамический структурный фактор в сравнении с данными численного моделирования

Результаты сравнивались с данными компьютерного моделирования [2] и хорошо с ними согласуются.



Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (2), штриховая линия соответствует результатам моделирования [2]. $G = 2, r_s = 2, ka = 0.3898$.

Рисунок 2 – Динамический структурный фактор в сравнении с данными численного моделирования



Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (3), штриховая линия соответствует результатам моделирования [2]. $G = 4, r_s = 1, ka = 0.3898$.

Рисунок 3 – Динамический структурный фактор в сравнении с данными численного моделирования

Заключение

Как видно из рисунков, метод моментов позволяет с большой точностью количественно и качественно воспроизводить имеющиеся данные численного моделирования, в рамках которых были определены динамические структурные факторы, при использовании различных эффективных потенциалов (1) – (3).

Таким образом, продемонстрирована возможность продуктивного использования классического метода моментов для анализа данных численного моделирования динамических свойств плотных кулоновских систем.

Как известно, динамические структурные факторы позволяют определять электродинамические характеристики системы. К примеру, зная положения пиков динамического структурного фактора или функции потерь на оси абсцисс (при фиксированных значениях волнового числа k) нетрудно определить дисперсию волн, а ширина динамического структурного фактора на полувысоте пропорциональна декременту диссипации этих волн.

Благодарности

Работа поддержана грантом Министерства образования и науки Республики Казахстан № AP05132333.

Список литературы

1. Morozov I., Reinholz H., Röpke G., Wierling A. and Zwicknagel G. Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas // Phys. Rev E. – 2005. – Vol.71. – P. 066408 – 066420.

2. Pschiwul T. and Zwicknagel G. Numerical simulation of the dynamic structure factor of a two – component model plasma. // Journal of Physics A: mathematical and general. Contrib. PlasmaPhys. - 2003. – Vol. 43, №. 5- 6. – P. 393-397.

3. Архипов Ю.В., Аскарулы А.А., Ашикбаева А.Б., БуртебаевА., Грушевская Е.А., Дубовцев Д.Ю., Лябухина К.О., Нурсеитова М., Сызганбаева С.А., Х. Ара, Ю. Колома, Ткаченко И.М. О коллективных процессах в плотной кулоновской однокомпонентной плазме // Журнал проблем эволюции открытых систем. – 2017. – Вып.19, Т. 1. – С.42-46.

4. Yu. V. Arkhipov, A. Askaruly, A. E. Davletov, D.Yu. Dubovtsev, Z. Donkó, P. Hartmann, I. Korolov, L. Conde, I. M. Tkachenko Direct Determination of Dynamic Properties of Coulomb and Yukawa Classical One-Component Plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119 – P. 045001.

5. Akhiezer N.I. The Classical Moment Problem. - New York: Hafner, 1965. – 253 p.

6. Igor M. Tkachenko, Yu.V. Arkhipov, A. Askaruly. The Method of Moments and its Applications in Plasma Physics (Lambert, Saarbrücken, 2012) 125 pp.

7. ArkhipovYu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Voronkov V.V., Davletov A. E., Tkachenko I.M. Static structural properties of nonideal plasmas // Международная научная конференция «Актуальные проблемы современной физики», - Алматы, 2013. - С. 171.

Принято в печать 10.05.2018

Ю.В. Архипов[1], А. Аскарулы[1], А.Б. Ашикбаева[1], Д.Ю. Дубовцев[1], Н. Мурсал[1], С.А. Сызганбаева[1], И.М. Ткаченко[2]

[1]*КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*;

[2]*Валенсийский политехнический университет, Валенсия, Испания*

ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ ФАКТОРЫ МОДЕЛЬНОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

Аннотация. В работе рассчитаны динамические структурные факторы (ДСФ) модельной двухкомпонентной водородной плазмы, которые хорошо согласуются как количественно, так и качественно с данными численных экспериментов других исследователей [1,2]. Эти характеристики позволяют исследовать как дисперсию волн, распространяющихся в плотной неидеальной плазме, так и их диссипацию [3]. Авторами использован метод моментов, не требующий использования малых параметров для решения задач. Математические основы этого метода позволяют использовать его для различных эффективных потенциаловмежчастичного взаимодействия в равновесной плазме. Особенностью данного подхода является необходимость знания выражения для так называемой параметр-функции Неванлинны, которая входит в расчетные соотношения. В данной работе в качестве этой величины использовано соотношение, предложенное ранее в [4].

Важным достоинством данного подходаявляется возможность определения динамических характеристик системы заряженных частиц по рассчитанным статическим. Последние найдены из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепномприближении с помощью потенциалов указанных в работе.

Ключевые слова: статический структурный фактор, динамический структурный фактор, метод моментов, формула Неванлинны, параметр-функция Неванлинны, функция потерь,флуктуационно-диссипативная теорема.

Ю.В. Архипов[1], Ә. Асқарұлы [1] , Ә.Б. Ашықбаева [1],
Д.Ю. Дубовцев, Н Мұрсал[1], С.А. Сызғанбаева[1], И.М. Ткаченко[2]
[1]*Аль-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан;*
[2]*Валенсия политехникалықуниверситеті, Валенсия, Испания*

ИДЕАЛДЫ ЕМЕС ҮЛГІЛІК ПЛАЗМАНЫҢ ДИНАМИКАЛЫҚ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ФАКТОРЛАРЫ

Анотация. Бұл жұмыста басқа зерттеушілердің сандық экспериментінен алынған нәтижелермен саны жағынан да және сапасы жағынан да жақсы үйлесетін үлгілік екікомпонентті сутекті плазманың динамикалық құрылымдық факторлары (ДҚФ) есептелінген [1, 2]. Бұл сипаттамалар идеалды емес тығыз плазмада таралған толқындардың дисперсиясын, оған қоса, олардың диссипациясын зерттеуге мүмкіндік береді [3]. Авторлар тапсырманы есептеу үшін қажетті кіші параметрлердің қолданылуын талап етпейтін моменттер әдісі қолданған. Бұл әдістің математикалық негіздері оны тепе-тең плазмадағы әртүрлі бөлшекаралық эффективті өзараәсерлесу потенциалдары үшін қолдануға мүмкіндік береді. Берілген әдістің ерекшелігі есептеу қатынастарына енетін Невалинна параметр-функциясына арналған өрнектерді білу қажеттілігі болып табылады. Бұл жұмыста осы шама ретінде жоғарыда көрсетілген қатынас қолданылған [4].

Берілген әдістің маңызды ерекшелігі зарядталған бөлшектер жүйесінің динамикалық сипаттамаларын есептелінген статикалық факторлары бойынша анықтау мүмкіндігі болып табылады. Олар гиперцепті жуықтаумен алынған Орнштейн-Цернике теңдеулерінің шешімдерінен жұмыста берілген потенциалдардың көмегімен табылған.

Түйін сөздер:статикалық құрылымдық фактор, динамикалық құрылымдық фактор, моменттер әдісі, Невалинна өрнектері, Невалинна параметр-функциясы, шығын функциясы, флуктуациялық-диссипативті теорема.

Yu.V. Arkhipov[1], A. Askaruly[1], A.B. Ashikbayeva[1],
D.Yu. Dubovtsev[1], N. Mursal[1],S.A. Syzganbayeva[1], I.M.(Tkachenko[2]
[1]Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Almaty, Kazakhstan;
[2]Polytechnic university of Valencia, Valencia, Spain

DYNAMIC STRUCTURAL FACTORS OF THE MODEL NONIDEAL PLASMA

Abstract. In this work, dynamic structural factors (DSFs) of the model two-component hydrogen plasma were calculated. They are in good agreement both quantitatively and qualitatively with the data of numerical experiments of other researchers [1, 2]. These characteristics make it possible to investigate both the dispersion of waves propagating in a dense nonideal plasma and their dissipation [3]. The authors used the method of moments, which does not require the use of small parameters for solving problems. The mathematical foundations of this method make it possible to use it for various effective interparticle interaction potentials in an equilibrium plasma. A special feature of this approach is the necessity to know the expression for the so-called Nevanlinna parameter-function, which is included in the calculation relations. In this paper, the ratio used is the one, which was proposed earlier in [4].

An important advantage of this approach is the ability to determine the dynamic characteristics of a system of charged particles using the calculated static characteristics. The latter were found from the solution of the Ornstein-Zernike equation in the hyper-netted chain approximation using the potentials indicated in this

Keywords: static structure factor, dynamic structure factor, method of moments, Nevanlinna formula, Nevanlinna parameter-function, loss function, fluctuation-dissipative theorem.