

Ж.А. Молдабеков, Т. Исмагамбетова, Т.С. Рамазанов

Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,
050040, Алматы, Казахстанzhandos@physics.kz**ЭКРАНИРОВАННЫЙ ИОН-ИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЕ**

Аннотация. Квантовая плазма является объектом активных теоретических и экспериментальных исследований последние несколько десятилетий. Развитие лазерной и ускорительной техники, в скором времени ожидается получение плотной плазмы с квантовыми ионами. В связи с этим, в этой статье представлен экранированный потенциал взаимодействия ионов с учетом их волновой природы, т.е. с учетом эффекта дифракции. При рассматриваемых параметрах электроны сильно вырождены. Для учета электронного вырождения была использована квантовая функция отклика электронов в приближении случайных фаз. С учетом того, что электроны при рассматриваемых плотностях идеальны, было использовано разложение электронной функции отклика плотность-плотность, до в третьего члена включительно, в длинноволновом пределе. Представлены графики полученного потенциала ион-ионного взаимодействия при различных параметрах плазмы. Полученный потенциал взаимодействия ионов имеет конечное значение на малых расстояниях за счет эффекта дифракции, т.е. волновой природы ионов проявляющееся в нелокальности. На больших расстояниях выведенный потенциал экранирован, при этом экранирование отличается от экранирования Томаса-Ферми. Обсуждено связь использованного метода диэлектрической проницаемости на основе функции отклика плотность-плотность от других методов, таких как квантовая гидродинамика и теория функционалов плотности.

Ключевые слова: Квантовая плазма, экранирование, эффект дифракции, ион-ионное взаимодействие, плотная плазма, функция отклика плотность-плотность.

Введение

Квантовая гидродинамика и использование уравнения Пуассона с распределением электронов в приближении локальной плотности, на основе которых были получены потенциал Акбари-Муханжоухи [1] и потенциал Стентонаи Мурилло [2], не позволяют получить эффективный потенциал взаимодействия ионов с учетом их волновой природы (квантового эффекта дифракции) на малых расстояниях. Учет волновой природы ионов должен привести к конечному значению эффективного потенциала на нуле, то есть без кулоновской сингулярности. Такой потенциал позволил бы реализовать квазиклассическое описание ионной подсистемы.

Эффективный потенциал взаимодействия с учетом волновой природы иона на малых межчастичных расстояниях может быть получен методом функции диэлек-

трического отклика. Для этого необходимо вместо потенциала Кулона использовать квазиклассический микропотенциал, который имеет конечное значение при $r = 0$. В качестве такого потенциала выберем потенциал Дойча [3-7]:

$$\varphi_{ii}^{Deutsch}(r) = \frac{Q_i^2}{r} \left(1 - \exp\left(-\frac{r}{\lambda_{ii}}\right) \right), \quad (1)$$

где $\lambda_{ii} = \hbar / \sqrt{\pi m_i k_B T}$ тепловая длина волны иона. Далее рассматривается водородная плазма. В этом случае ионом является протон, для описания которого можно использовать тепловую длину волны λ_{ii} в квазиклассическом приближении. В случае иона, который состоит из нескольких нуклонов использование (1) с тепловой длиной волны λ_{ii} требует обоснования. Вопрос о квазиклассическом микропотенциале взаимодействия ионов, которые состоят

из нескольких нуклонов, остается открытым.

Параметры плазмы

Для описания состояния плазмы используем безразмерный параметр плотности $r_s = a/a_B$, который определяет отношение среднего межчастичного расстояния $a = (4/3\pi n)^{-1/3}$ к первому радиусу Бора $a_B = \hbar^2/m_e e^2$, и параметр вырождения электронов $\theta = k_B T/E_F$ - отношение тепловой энергии электрона $k_B T$ к энергии Ферми $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m_e$. Будем рассматривать плотную плазму с параметром плотности равным или меньшим единицы $r_s \leq 1$.

Квазиклассический микропотенциал (1) применим для описания полностью ионизованной плазмы. При рассматриваемых плотностях плазмы, $r_s < 1$, вследствие ионизации давлением (переход Мотта) в плазме не образуются связанные состояния [6]. Квазиклассичность ионной подсистемы означает, что параметр вырождения ионов (протонов) θ_i должен быть достаточно большим. Далее рассматриваем случай при $\theta_i \geq 0.5$. С другой стороны квазиклассическое описание ионов требуется, когда параметр вырождения ионов порядка единицы $\theta_i \sim 1$. При этом параметр вырождения электронов $\theta = \theta_i \times m_e/m_i \ll 1$, то есть электронная подсистема полностью вырождена. Вследствие этого химический потенциал электронов можно брать равным энергии Ферми электронов, где интегралы Ферми-Дирака заменяются известными предельными значениями при $\eta \rightarrow \infty$. Также отметим, что при $\theta_i \geq 0.5$ и $r_s < 1$ эффективный параметр связи ионной подсистемы всегда $\Gamma_{ii}^* \leq 1$, где $\Gamma_{ii}^* = Q_i^2 / ak_B T \times \exp(-ak_Y)$ определяется как отношение энергии взаимодействия ионов с учетом экранирования на среднем межчастичном расстоянии на их тепловую энергию [8]. Это означает, что ионная подсистема слабосвязанная и при необходимости можно учесть экранирование за счет

ионов в рамках приближения случайных фаз (ПСФ).

Ион-ионный потенциал взаимодействия квантовой плазмы

Статическая диэлектрическая проницаемость в ПСФ имеет следующий вид:

$$\varepsilon_{RPA}(k, \omega = 0) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \Pi_{RPA}^e(k, 0) - \frac{4\pi Q_i^2}{k^2} \Pi_{RPA}^i(k, 0), \quad (2)$$

где Π_{RPA}^e - поляризационная функция электронов и Π_{RPA}^i - поляризационная функция ионов.

Используя разложение в длинноволновом пределе поляризационной функции (2) [9], которое применимо так же в случае протонов при замене массы электронов массой ионов, и Фурье образ микропотенциала Дойча

$$\tilde{\varphi}_{ii}^{Deutsch}(k) = \frac{4\pi Q_i^2}{k^2 + k^4 \lambda_{ii}^2}, \quad (3)$$

находим из уравнения

$$\Phi_{ii}(\vec{r}) = \int \frac{d^3 k}{2\pi^2} \frac{Q_i^2}{(k^2 + k^4 \lambda_{ii}^2)} \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r})}{\varepsilon(\vec{k}, \omega = 0)}, \quad (4)$$

следующий эффективный квазиклассический потенциал взаимодействия ионов в плотной двухкомпонентной плазме с вырожденными электронами:

$$\Phi_{ii}(r) = \frac{Q_i^2}{r} \times [\xi \exp(-r/\lambda_{ii}) + \gamma \exp(-Cr) + \alpha \exp(-Ar) + \beta \exp(-Br)], \quad (5)$$

где постоянные $\xi, \alpha, \beta, \gamma, A, B, C$ зависят от плотности и температуры плазмы:

$$\xi_{n,T} = \frac{\lambda_{ii}^4}{\tilde{a}_2^e/\tilde{a}_0^e \tilde{a}_2^i/\tilde{a}_0^i} + \frac{\lambda_{ii}^2 \tilde{a}_2^e/\tilde{a}_0^e^{-1} + \tilde{a}_2^i/\tilde{a}_0^i^{-1} - 1}{1 - \lambda_{ii}^2 A^2 \quad 1 - \lambda_{ii}^2 B^2 \quad 1 - \lambda_{ii}^2 C^2}, \quad (6)$$

$$\gamma_{n,T} = \frac{1}{\tilde{a}_2^e/\tilde{a}_0^e \tilde{a}_2^i/\tilde{a}_0^i} - \frac{C^2 \tilde{a}_2^e/\tilde{a}_0^e^{-1} + \tilde{a}_2^i/\tilde{a}_0^i^{-1} + C^4}{1 - \lambda_{ii}^2 C^2 \quad A^2 - C^2 \quad B^2 - C^2}, \quad (7)$$

$$\alpha_{n,T} = \frac{1}{\frac{\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e}{1 - \lambda_{ii}^2 A^2} \frac{\tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i}{A^2 - B^2} - A^2 - C^2} - \frac{A^2 \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + \tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i^{-1} + A^4}{1 - \lambda_{ii}^2 A^2 \quad A^2 - B^2 \quad A^2 - C^2}, \quad (8)$$

$$\beta_{n,T} = \frac{1}{\frac{\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e}{1 - \lambda_{ii}^2 B^2} \frac{\tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i}{A^2 - B^2} - B^2 - C^2} + \frac{B^2 \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + \tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i^{-1} - B^4}{1 - \lambda_{ii}^2 B^2 \quad A^2 - B^2 \quad B^2 - C^2}, \quad (9)$$

$$A^2(n,T) = l - (B^2 + C^2), \quad (10)$$

$$B^2(n,T) = \frac{1}{2}(l - c^2) + \frac{1}{2}\sqrt{(l - c^2) - \frac{4c}{C^2}}, \quad (11)$$

$$C^2(n,T) = \tau - \frac{p}{3\tau} + \frac{l}{3}, \quad (12)$$

где $l = \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e + \tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i$,

$$b = \frac{(1 + \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e k_{Ye}^2 + \tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i k_{Yi}^2)}{(\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e)(\tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i)},$$

$$c = \frac{k_{Ye}^2 + k_{Yi}^2}{(\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e)(\tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i)}, \quad p = b - l^2 / 3,$$

$$\tau = \left(-q/2 - \sqrt{q^2 + (4p^3/27)} / 2 \right)^{1/3},$$

$$q = 2l^3 / 27 + lb / 3 - c.$$

Полученный экранированный квазиклассический потенциал (5) всегда вещественен и однозначен при всех значениях температуры и плотности плазмы, несмотря на то, что комплексные числа могут появиться в промежуточных расчетах. Поэтому, в принципе, нет смысла дополнительно выражать (5) через тригонометрические функции. Отметим, что в случае использования эффективного потенциала (5) в моделировании ионной подсистемы плазмы методами молекулярной динамики или Монте-Карло необходимо положить $k_{Yi} = 0$ и $\tilde{a}_2^i / \tilde{a}_0^i = 0$ во избежание двукратного учета экранирования ионами. Это означает, что надо отбросить третий член в статической диэлектрической функции (2).

В этом случае потенциал (5) принимает следующий вид:

$$\Phi_{ii}(r) = \frac{Q_i^2}{r} \times \left[\xi' \exp -r / \lambda_{ii} + \alpha' \exp -A'r + \beta' \exp -B'r \right], \quad (13)$$

с коэффициентами

$$A'^2_{n,T} = \frac{1}{2} \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + k_{Ye}^2.$$

$$\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4k_{Ye}^2}{\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e{}^2 \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + k_{Ye}^2}} \right), \quad (14)$$

$$B'^2_{n,T} = \frac{1}{2} \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + k_{Ye}^2.$$

$$\left(1 - \sqrt{1 - \frac{4k_{Ye}^2}{\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e{}^2 \tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e^{-1} + k_{Ye}^2}} \right), \quad (15)$$

$$\xi'(n,T) = \frac{\lambda_{ii}^2 (\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e)^{-1} - 1}{(1 - \lambda_{ii}^2 A'^2)(1 - \lambda_{ii}^2 B'^2)}, \quad (16)$$

$$\alpha'(n,T) = \frac{(\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e)^{-1} - A'^2}{(B'^2 - A'^2)(1 - \lambda_{ii}^2 A'^2)}, \quad (17)$$

$$\beta'(n,T) = \frac{B'^2 - (\tilde{a}_2^e / \tilde{a}_0^e)^{-1}}{(B'^2 - A'^2)(1 - \lambda_{ii}^2 B'^2)}. \quad (18)$$

В пределе $\lambda_{ii} \rightarrow 0$ эффективный потенциал (13) переходит в потенциал Стентона и Мурилло [2]. Если дополнительно пренебречь градиентной поправкой и положить $\tilde{a}_2 = 0$ получим экранированный потенциал типа Юкавы. На рисунке 1 приведены эффективный квазиклассический потенциал (5), который учитывает квантовый эффект дифракции и экранированный потенциал не учитывающий волновую природу частиц при $\theta_i = 0.5$ и $r_s = 0.5$. Как видно из рисунка, потенциал (5) имеет конечное значение при $r = 0$, напротив, потенциал не учитывающий волновую природу частиц при $r \rightarrow 0$ стремится к бесконечности как $1/r$. Видно, что на дальних расстояниях эффективный квазиклассический потенциал (5) экранирован

слабее чем потенциал не учитывающий волновую природу частиц.

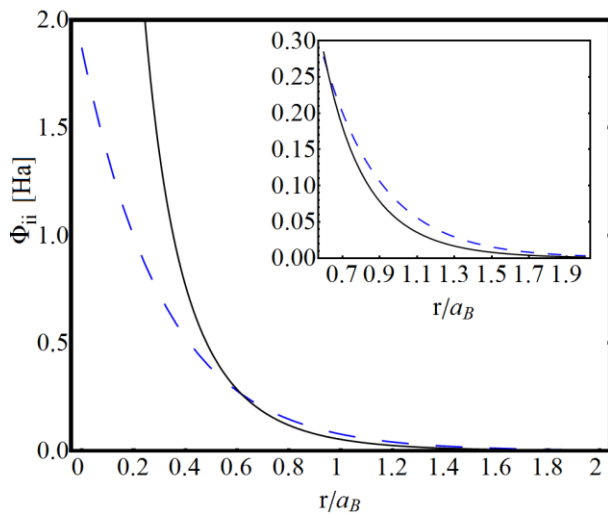


Рисунок 1 - Эффективный квазиклассический потенциала (5) (пунктирная линия) и потенциал не учитывающий волновую природу частиц (сплошная линия)

На рисунке 2 приведены графики эффективного квазиклассического потенциала (5) при различных значениях параметра плотности. Видно, что с увеличением параметра плотности на дальних расстояниях экранирование становится сильнее, а значение потенциала на нуле увеличивается. В случае взаимодействия электрона с положительным ионом, это интерпретируется как снижение потенциала ионизации под влиянием микрополя плазмы.

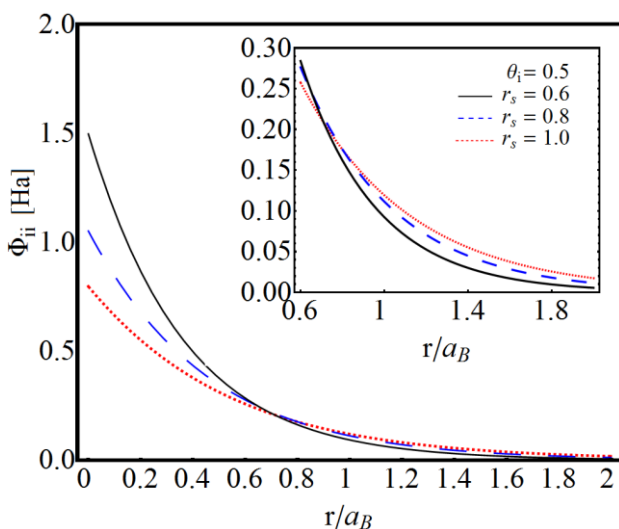


Рисунок 2 – Эффективный квазиклассический потенциала (5)

На рисунке 3 приведены графики эффективного квазиклассического потенциала (5) при различных значениях параметра вырождения ионов. С уменьшением параметра вырождения, то есть с уменьшением температуры, значение эффективного потенциала на нуле уменьшается вследствие увеличения тепловой длины волны иона.

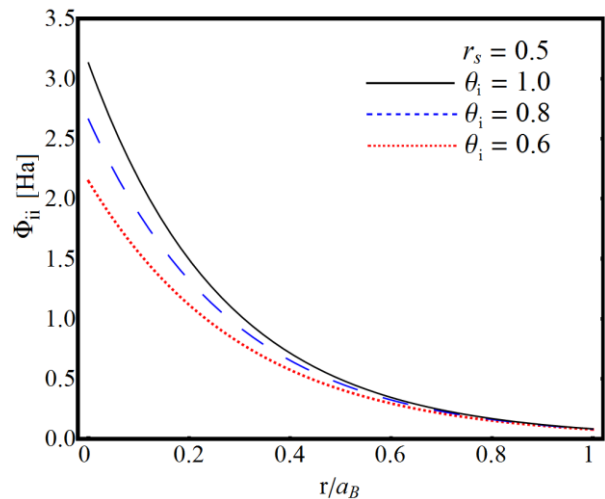


Рисунок 3 - Эффективный квазиклассический потенциала (5)

Заключение

В рамках настоящей работы получен статически экранированный потенциал взаимодействия ионов в плотной плазме с учетом волновой природы ионов (эффекта дифракции) и экранирования на основе разложение диэлектрической проницаемости в длинноволновом пределе. Изучен полученный статически экранированный потенциал взаимодействия ионов в плотной плазме. Выведенный эффективный потенциал взаимодействия ионов имеет конечное значение на малых расстояниях за счет эффекта дифракции, т.е. волновой природы ионов проявляющееся в нелокальности. На больших расстояниях полученный потенциал экранирован слабее чем в случае экранирования Томаса-Ферми.

Эта работа была выполнена в рамках гранта на проект №AP05134366 Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

- 1 Akbari-Moghanjoughi M. Hydrodynamic limit of Wigner-Poisson kinetic theo-

ry: Revisited //Phys. Plasmas-2015.-Vol.22.-P.022103.

2 Stanton L.G. and Murillo M.S. Unified description of linear screening in dense plasmas //Phys. Rev. E-2015.-Vol.91.-P.033104.

3 Kelbg G.Theorie des Quanten-Plasmas //Ann. Phys.-1963.-Vol.12.-P. 219.

4 Dunn T. and Broyles A. A. Method for Determining the Thermodynamic Properties of the Quantum Electron Gas //Phys. Rev.-1967.-Vol.157.-P.156.

5 Deutsch C. Nodal Expansion in a Real Matter Plasma //Phys. Lett. A.-1977.-Vol.60.-P.317.

6 Filinov A.V., Bonitz M., and Ebeling W. Improved Kelbg potential for correlated

Coulomb systems //J. Phys. A: Math. Gen.-2003.-Vol.36.-P.5957-5962.

7 MoldabekovZh.A., Ramazanov T.S., and Dzhumagulova K.N. Pair Interaction Potential of Particles for Two-Component Plasma //Contrib. Plasma Phys.-2012.-Vol.52.-P.207-210.

8 Khrapak S.A. and Thomas H.M Practical expressions for the internal energy and pressure of Yukawa fluids //Phys. Rev. E.-2015.-Vol.91.-P.023108.

9 MoldabekovZh., SchoofT., Ludwig P, Bonitz M., and Ramazanov T. Statically screened ion potential and Bohm potential in a quantum plasma //Phys. Plasmas-2015.-Vol.22.-P.102104.

Принято к печати 30.07.2019

Ж.А. Молдабеков, Т. Исмагамбетова, Т.С. Рамазанов
Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,
050040, Алматы, Казахстан

e-mail: zhandos@physics.kz

ЭКРАНИРОВАННЫЙ ИОН-ИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЕ

Аннотация. Квантовая плазма является объектом активных теоретических и экспериментальных исследований последние несколько десятилетий. Развитие лазерной и ускорительной техники, в скором времени ожидается получение плотной плазмы с квантовыми ионами. В связи с этим, в этой статье представлен экранированный потенциал взаимодействия ионов с учетом их волновой природы, т.е. с учетом эффекта дифракции. При рассматриваемых параметрах электроны сильно вырождены. Для учета электронного вырождения была использована квантовая функция отклика электронов в приближении случайных фаз. С учетом того, что электроны при рассматриваемых плотностях идеальны, было использовано разложение электронной функции отклика плотность-плотность, до в третьего члена включительно, в длинноволновом пределе. Представлены графики полученного потенциала ион-ионного взаимодействия при различных параметрах плазмы. Полученный потенциал взаимодействия ионов имеет конечное значение на малых расстояниях за счет эффекта дифракции, т.е. волновой природы ионов проявляющееся в нелокальности. На больших расстояниях выведенный потенциал экранирован, при этом экранирование отличается от экранирования Томаса-Ферми. Обсуждено связь использованного метода диэлектрической проницаемости на основе функции отклика плотность-плотность от других методов, таких как квантовая гидродинамика и теория функционалов плотности.

Ключевые слова: Квантовая плазма, экранирование, эффект дифракции, ион-ионное взаимодействие, плотная плазма, функция отклика плотность-плотность.

Zh.A. Moldabekov, T. Ismagambetova, T.S.Ramazanov

Al-Farabi Kazakh National University,

Institute of Experimental and Theoretical Physics, 050040, Almaty, Kazakhstan

e-mail: zhandos@physics.kz

SCREENED ION-ION INTERACTION POTENTIAL IN DENSE PLASMAS

Annotation. Quantum plasma has been the subject of active theoretical and experimental research over the past few decades. The development of laser and accelerator technology, it is soon expected to obtain a dense plasma with quantum ions. In this regard, this article presents the screened potential of the interaction of ions, taking into account their wave nature, i.e. taking into account the diffraction effect. At the considered parameters, the electrons are strongly degenerate. To take into account electron degeneracy, we used the quantum electron response function in the random-phase approximation. Given that the electrons at the densities under consideration are ideal, we used the expansion of the electron density-density response function, up to and including the third term, in the long-wavelength limit. The graphs of the obtained ion-ion interaction potential for various plasma parameters are presented. The obtained ion interaction potential has a finite value at small distances due to the diffraction effect, i.e. wave nature of ions manifested in non-locality. At large distances, the derived potential is screened, and the screening differs from the Thomas-Fermi screening. The relationship of the used dielectric permittivity method based on the density-density response function to other methods, such as quantum hydrodynamics and the theory of density functionals, is discussed.

Key words: quantum plasma, screening, diffraction effect, ion-ion interaction, dense plasma, density-density response function.

Ж.А. Молдабеков, Т. Исмагамбетова, Т.С. Рамазанов

*Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті,
Экспериментальды және теориялық физика ғылыми зерттеу институты,
0500400, Алматы, Қазақстан
e-mail: zhandos@physics.kz*

ТЫҒЫЗ ПЛАЗМАДАҒЫ ЭКРАНДАЛҒАН ИОН-ИОН ӘСЕРЛЕСУ ПОТЕНЦАЛЫ

Аннотация. Кванттық плазма соңғы онжылдық уақыт мезетінде теориялық және эксперименттік тұрғыдан белсенді түрде зерттелініп келе жатырған ғылыми объекті болып табылады. Лазерлік және үдеткіш техниканың дамуына байланысты жақын арада кванттық иондары бар тығыз плазманы алу жоспарланған. Сол себепті осы мақалада кванттық иондардың толқындық табиғаты, яғни дифракция эффектісі ескерілген экрандалған әсерлесу потенциалы ұсынылады. Қарастырылып отырған параметрде электрон азғындалған күйде. Электронның азғындалған күйін ескеру мақсатында кездейсоқ фазадағы электрондардың кванттық сарқындалу функциясы қолданылды. Қарастырылып отырған тығыздықта электрондардың идеальды екені ескерілгендіктен электрондардың тығыздық-тығыздық сарқындылығынан бастап ұзынтолқынды шекте, яғни үшінші мүшеге дейінгі таралуы қолданылды. Плазманың әртүрлі параметріндегі ион-ион әрекеттесу потенциалының графигі көрсетілген. Иондардың әрекеттесу потенциалы аз арақашықтықта дифракция эффектісі әсерінен, яғни локальды болмауының салдарынан иондардың толқындық табиғаты байқалуына байланысты шектік мәнге ие. Алыс қашықтықта алынған потенциал экрандалған және алынған экрандалу Томас-Ферми экрандалуынан ерекшеленеді. Тығыздық-тығыздық үндесу функциясының негізінде диэлектрлік өтімділік әдісінің кванттық гидродинамика және тығыздықтар функциясының теориясы тәрізді басқа әдістермен байланысының қолданылуы талқыланды.

Түйін сөздер: Кванттық плазма, экрандалу, дифракция эффектісі, ион-ион әсерлесуі, тығыз плазма, тығыздық-тығыздық сарқындалу функциясы.