УДК 533.9

Ю. В. АРХИПОВ[1], *А. АСКАРУЛЫ*[1], *А. Б. АШИКБАЕВА*[1], *С. А. СЫЗГАНБАЕВА*[1], *И. М. ТКАЧЕНКО*[2]

([1]НИИ Экспериментальной и теоретической физики,
Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
[2]Институт чистой и прикладной математики Валенсийского политехнического университета,
Валенсия, Испания)

ДИНАМИЧЕСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР МОДЕЛЬНОЙ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ

Аннотация. Проведено успешное сравнение расчетного динамического структурного фактора заряд-заряд модельной неидеальной плазмы с соответствующими данными численного моделирования, полученными методом молекулярной динамики. При этом структурный фактор определялся на основе метода моментов, а статические характеристики рассчитывались в рамках гиперцепного приближения. Преимущество метода моментов заключается в его независимости от наличия в системе малых параметров, что характерно для неидеальной плазмы

Ключевые слова: кулоновская система, функция потерь, правила сумм, метод моментов, динамический структурный фактор.

Тірек сөздер: кулон жүйесі, шығындалу функциясы, қосындылар ережелері, моменттер әдісі, динамикалық құрылымдық фактор.

Keywords: coulomb systems, loss function, sum rules, method of moments, dynamic structure factor.

Введение. Существующие методы создания и диагностики неидеальной плазмы затрудняют ее экспериментальное исследование. Поэтому современные исследования, в частности, динамических характеристик неидеальной плазмы, проводятся путем ее численного моделирования [1, 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 заряженными частицами.

В неидеальной плазме отсутствуют малые параметры, поэтому наиболее адекватным способом изучения ее динамических свойств является непертурбативный метод моментов. Для его применения необходимо предварительно найти частотные моменты функции потерь $L(k,\omega) = -\dfrac{1}{\omega}\mathrm{Im}\dfrac{1}{\varepsilon(k,\omega)}$, где $\varepsilon(k,\omega)$ – диэлектрическая функция плазмы.

Основным достоинством метода моментов является то, что он позволяет определять динамические структурные факторы по рассчитанным статическим характеристикам, с учетом параметр – функции Неванлинны, принадлежащей определенному математическому классу. Особую привлекательность методу моментов придает возможность проведения расчетов для непертурбативных систем в широком интервале параметра связи. При этом не требуется проводить никакого разложения по степени неидеальности, как, например, в кинетической теории [3].

1. Метод моментов для ДКП. В данной работе исследуется двухкомпонентная полностью ионизованная водородная плазма, которая описывается безразмерными параметрами неидеальности, плотности и вырождения:

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{a},\ \beta = \frac{1}{k_B T},\ r_s = \frac{a}{a_0},\ \theta = \frac{1}{\beta E_F} = 2\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{2/3}\frac{r_s}{\Gamma}.$$

Здесь введен радиус Вигнера-Зейтца

$$a = \sqrt[3]{3/4\pi n},$$

где y – заряд электрона, $k_Б$ – постоянная Больцмана, T – температура, n – концентрация частиц ($n_e = n_i$), a_0 – первый радиус боровской орбиты электрона в атоме, E_F – энергия Ферми системы.

В данном разделе используются три вида псевдопотенциалов:

1) потенциал Дойча, в котором учитывается квантово–механический эффект дифракции

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

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

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

3) модифицированный потенциал Кулона II

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

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

Как известно [4], использование метода моментов позволяет определить диэлектрические свойства кулоновской системы, используя несколько первых моментов функции потерь $L(k,\omega)$, которые можно рассчитать, зная потенциал межчастичного взаимодействия и статические структурные факторы $S_{ab}(k)$. Последние могут быть вычислены из решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении [5].

Запишем формулу Неванлинны, определяющую диэлектрические свойства среды, в виде

$$\frac{1}{\varepsilon(k,\omega)} = 1 + \frac{\omega_p^2 (z + Q)}{z(z^2 - \omega_2^2) + Q(z^2 + \omega_1^2)}, \tag{4}$$

где $\omega_1^2 = C_2(k)/C_0(k)$, $\omega_2^2 = C_4(k)/C_2(k)$, $Q(k,z)$ – такая функция класса Неванлинны [6], что $\lim\limits_{z\to\infty}\left(Q(k,z)/z\right) = 0, \operatorname{Im} z > 0$. Параметры $C_\nu(k)$ определены как степенные частотные моменты четной функции потерь:

$$C_\nu(k) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{\nu-1} \operatorname{Im} \varepsilon^{-1}(k,\omega) d\omega. \tag{5}$$

Прямое квантово-статистическое вычисление моментов позволяет записать выражения для них в виде

$$\begin{gathered} C_0 = 1 - \varepsilon^{-1}(k,0) = 1 - \varepsilon^{-1}(k), \\ C_2 = \omega_p^2, \\ C_4 = \omega_p^4(\zeta_{ee}(q) + K(k) + U(k) + H), \end{gathered} \tag{6}$$

где

$$K(k) = \frac{\langle v_e \rangle^2 k^2}{\omega_p^2} + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{k^2}{\omega_p^2}, \tag{7}$$

$$H = \omega_p^4\left(-\frac{1}{6\pi^2 n_e}\int_0^{\infty} q^2 S_{ei}(q)\zeta_{ei}(q)dq\right), \tag{8}$$

$$U(k)=\omega_p^4\left(\frac{1}{16\pi^2 n_e}\int_0^\infty q^2(S_{ee}(q)-1)\left(Z_{ee}(k,q)-\frac{8\zeta_{ee}(q)}{3}\right)dq\right), \tag{9}$$

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

Здесь $\zeta_{ab}(q)$ – формфактор, связанный с потенциалом взаимодействия как $\Phi_{ab}(q)=\frac{4\pi e^2}{q^2}\zeta_{ab}(q)$, $\zeta_{ab}(q)=\zeta_{ba}(q)$, $\left\langle v_e^2\right\rangle=3\frac{\theta}{m\beta}F_{3/2}(\eta)$ – средний квадрат тепловой скорости электронов, m – их масса, F_ν – интеграл Ферми, который определяется как

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

$\eta=\beta\mu$ – безразмерный химический потенциал системы, определяемый из условия нормировки:

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

2. Динамический структурный фактор. Динамический структурный фактор «заряд-заряд» напрямую связан с обратной продольной диэлектрической функцией плазмы посредством (классического варианта) флуктуационно-диссипативной теоремы:

$$S_{zz}(k,\omega)=-\frac{\operatorname{Im}\varepsilon^{-1}(k,\omega)}{\pi\beta\phi(k)\omega}, \tag{8}$$

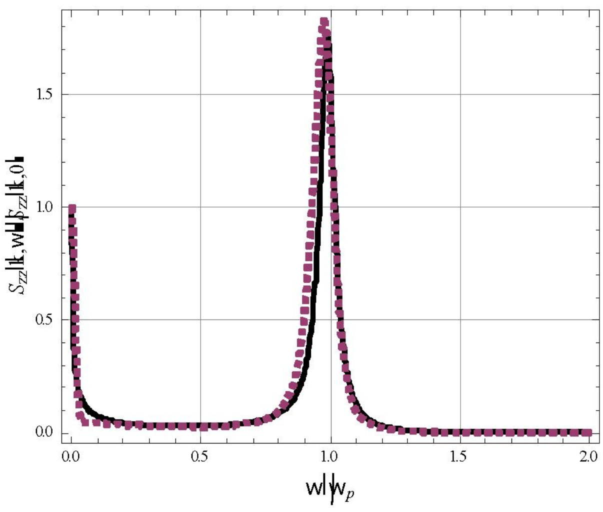
где $\phi(k)=\frac{4\pi e^2}{k^2}$ – фурье-образ кулоновского потенциала.

После подстановки выражения (4) в (8), мы получим выражение для динамического структурного фактора

$$S_{zz}(k,\omega)=\frac{\omega_p^2}{\pi\beta\phi(k)}\frac{\left[\omega_2^2(k)-\omega_1^2(k)\right]\operatorname{Im}Q(k,\omega)}{\left|\omega\left(\omega^2-\omega_2^2(k)\right)+Q(k,\omega)\left(\omega^2-\omega_1^2(k)\right)\right|^2}, \tag{9}$$

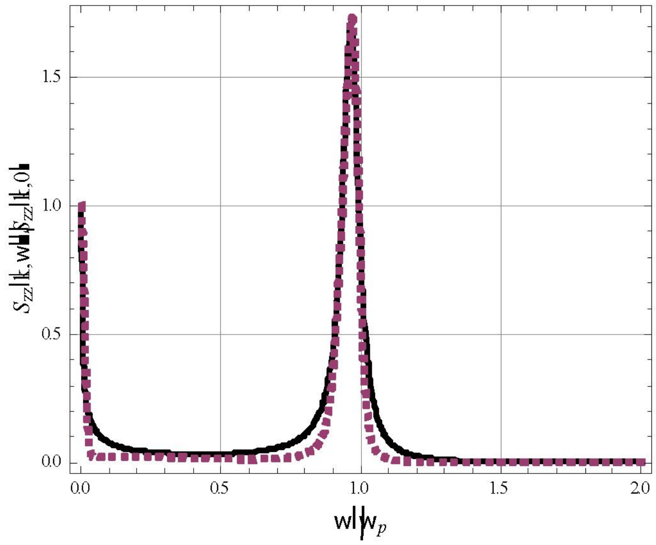
где функция параметр Неванлинны определяется как $Q(k,\omega)=B(k)\sqrt{\omega}(1+i)$.

Ниже на рисунках 1–3 представлены графики ДСФ, приведенные к безразмерному виду $\frac{S_{zz}(k,\omega)}{S_{zz}(k,\omega\approx 0)}$ в зависимости от безразмерной частоты $\frac{\omega}{\omega_p}$, при различных параметрах связи и



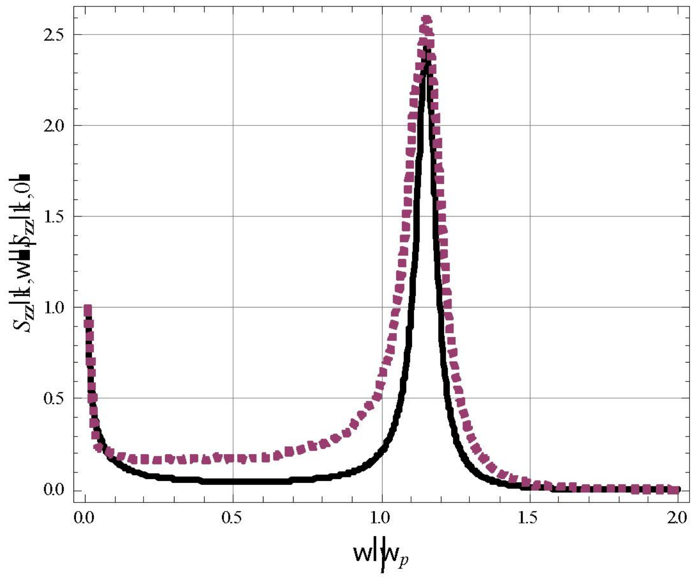
Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (1), штриховая линия соответствуют результатам моделирования [2]. $\Gamma=2$, $r_s=0{,}497$, $ka=0{,}3898$, $\lambda_{ei}=0{,}8$.

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



Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (2), штриховая линия соответствуют результатам моделирования [2]. $\Gamma = 2$, $r_s = 0{,}497$, $ka = 0{,}3898$, $\lambda_{ei} = 0{,}8$.

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



Непрерывная линия получена методом моментов для потенциала (3), штриховая линия соответствуют результатам моделирования [2]. $\Gamma = 0{,}5$, $r_s = 0{,}497$, $ka = 0{,}3898$, $\lambda_{ei} = 0{,}4$.

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

волнового числа. Результаты сравнивались с данными компьютерного моделирования [2], которые также нормированы на значение ДСФ на определенной частоте незначительно превышающий $\omega = 0$ и согласуются с ними вполне удовлетворительно. Параметр λ_{ei} – приведенная длина волны де Бройля, определенная выше.

Выводы. Продемонстрирована возможность продуктивного использования классического метода моментов для анализа данных численного моделирования динамических свойств плотных кулоновских систем.

Благодарности. *Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку работы МОН РК, гранты (1128/ГФ, 1099/ГФ).*

ЛИТЕРАТУРА

1 Morozov I. , Reinholz H., R?pke G., Wierling A., and Zwicknagel G., Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas // Phys. Rev E. – 2005. – Vol. 71. – P. 066408 (12 p.).

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. Plasma Phys. 2003. – Vol. 43. – N 5- 6. – P. 393-397.

3 Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. Основы электродинамики плазмы. – М.: Высшая школа. – 1988. – 424 с.

4 Arkhipov, Yu.V., Askaruly, A., Ballester, D., Davletov, A.E., Meirkanova, G.M., Tkachenko, I. M. Collective and static properties of model two component plasmas // Phys. Rev. E. - 2007. - Vol. 76. - P. 026403.

5 Arkhipov Yu. V., Ashikbaeva A.B., Baimbetov F.B., Davletov A.E., Starikov K.V.. Dissipation of plasmons in semiclassical plasmas.// IV International conference “Plasma Physics and Plasma Technology”, Contributed Papers, 2003 v.1, p.233.
6 Krein M. G., Nudel’man A. A. The Markov moment problem and extremal problems // Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Societ. – 1977. – Vol. 50. – P. 417.

REFERENCES

1 Morozov I. , Reinholz H., R?pke G., Wierling A., and Zwicknagel G., Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas // Phys. Rev E. – 2005. – Vol.71. – P. 066408 (12 p.).
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. Plasma Phys. 2003. – Vol. 43. – No. 5- 6. – P. 393-397.
3 Aleksandrov A.F., Bogdankevich L.S., Ruhadze A.A. Osnovy elektrodinamiki plasmy. – M.: Vysshay shkola – 1988. – 424 p. (in Russ)
4 Arkhipov, Yu.V., Askaruly, A., Ballester, D., Davletov, A.E., Meirkanova, G.M., Tkachenko, I. M. Collective and static properties of model two component plasmas // Phys. Rev. E. - 2007. - Vol. 76. - P. 026403.
5 Arkhipov Yu. V., Ashikbaeva A.B., Baimbetov F.B., Davletov A.E., Starikov K.V.. Dissipation of plasmons in semiclassical plasmas.// IV International conference “Plasma Physics and Plasma Technology”, Contributed Papers, 2003 v.1, p.233.
6 Krein M. G., Nudel’man A. A. The Markov moment problem and extremal problems // Translations of Mathematical Monographs. American Mathematical Societ. – 1977. – Vol. 50. – P. 417.

Резюме

Ю. В. Архипов[1], А. Асқарұлы[1] , Ә. Б. Ашықбаева[1], С. А. Сызғанбаева[1], И. М. Ткаченко[2]

([1]Эксперименттік және теориялық физика ҒЗИ,
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
[2]Валенсия Политехникалық университетінің таза және қолданбалы математика институты,
Валенсия, Испания)

КУЛОН МОДЕЛІ ЖҮЙЕСІНІҢ ДИНАМИКАЛЫҚ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ФАКТОРЛАРЫ

Молекулалық динамика әдісімен алынған сан модельдеудің сәйкес мәліметтерімен заряд-заряд модельдік идеалды емес плазманың есептік динамикалық құрылымдық фактордың сәтті салыстыруы өткізілді. Сонымен қатар құрылымдық фактор момент әдісінің негізінде анықталды, статикалық мінездемелер ГПЖ әдісімен есептелінді. Момент әдісінің артықшылығы жүйедегі кіші параметрлердің болу тәуелсіздігінде. Бұл идеал емес плазмаға тән.
Тірек сөздер: кулон жүйесі, шығындалу функциясы, қосындылар ережелері, моменттер әдісі, динамикалық құрылымдық фактор.

Summary

Yu. V. Arkhipov[1], A. Askaruly[1], A. B. Ashikbaeva[1], S. A. Syzganbaeva[1], I. M. Tkachenko[2]

([1]SRI of Experimental and Theoretical physics,
Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
[2]Institute of Pure and Applied Mathematics, Valencia Polytechnic University, Valencia, Spain)

DYNAMIC STRUCTURE FACTOR COULOMB MODEL SYSTEMS

Conducted a successful comparison of the calculated dynamic structure factor of the charge- charge model nonideal plasma with the corresponding data of numerical simulation obtained by the method of molecular dynamics. In this case the structure factor was determined in frames on the method of moments, and static characteristics are calculated within the HNC approximation. The advantage of the method of moments is its independence from the presence in the system of small parameters , which is typical for a nonideal plasma.
Keywords: coulomb systems, loss function, sum rules, method of moments, dynamic structure factor.