

УДК 533.9.01; 533.9...1
МРНТИ 29.27.03; 29.27.47

ИОН-ИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С УЧЕТОМ ИОННОГО ОСТОВА

ИСМАГАМБЕТОВА Т.Н.¹, ГАБДУЛЛИН М.Т.², РЕДМЕР Р.³

¹Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,
Казахский Национальный университет имени аль-Фараби

²Казахстанско-Британский технический университет

³Институт физики, Ростокский университет, Германия

Аннотация: Горячая плотная материя характеризуется сильно связанными ионами и представляет собой сильно связанную квантовую систему. Сильно связанная плазма является объектом активных теоретических и экспериментальных исследований, таких как изучение астрофизических объектов и плазмы в инерциальных термоядерных установках синтеза в настоящее время. В такой сильно связанной плазме важное место занимают коллективные эффекты (эффекты экранирования). Эффективные потенциалы взаимодействия заряженных частиц используются для учета эффектов экранирования, т.е. учитывают влияние окружающих частиц на межчастичное рассеяние в системе. Эффект электронов ядра может быть описан эффективным электрон-ионным потенциалом, сильно модифицированным вблизи ядра во время приближения к кулоновскому потенциалу на больших расстояниях. В частично ионизованной плазме взаимодействие между свободными электронами и ионами зависит также от занятых связанных состояний. В связи с этим, в этой статье рассмотрен экранированный потенциал взаимодействия ионов с учетом влияния занятых основных состояний на взаимодействие свободных электронов с ионами в частично ионизованной плазме. Наиболее простой формой для такого псевдопотенциала является потенциал пустого ядра. В данной статье для устранения влияния сильных колебаний в пространстве Фурье был использован потенциал с мягким пустым ядром. Представлены графики данного потенциала ион-ионного взаимодействия при различных параметрах плазмы. Рассматриваемый потенциал взаимодействия ионов на больших расстояниях экранирован слабее, чем в случае экранирования Юкавы. С увеличением параметра связи на дальних расстояниях экранирование становится слабее из-за увеличения тепловой длины волны иона.

Ключевые слова: сильно связанная плазма, экранирование, ион-ионное взаимодействие, плотная плазма, эффективный потенциал

ИОНДЫҚ ҚҰРЫЛЫМ ЕСКЕРІЛГЕН ИОН-ИОНДЫҚ ӘСЕРЛЕСУ ПОТЕНЦИАЛЫ

Аңдатпа: Ыстық тығыз материяда иондардың күшті әсерлесуі сипатталады және ол өз алдына күшті байланысқан кванттық жүйе болып табылады. Тығыз байланысқан плазма – қазіргі уақытта инерциялық термоядролық синтездеу қондырғыларында, астрофизикалық нысандарды зерттеу барысындағы, белсенді теориялық және тәжірибелік зерттеулердің негізгі тақырыбы. Тығыз байланысқан плазмада ұжымдық эффектілер (экрандалу эффектісі) маңызды рөл атқарады. Зарядталған бөлшектердің әсерлесуінің эффективті потенциалы экрандалу эффектісін ескеру үшін, яғни жүйедегі бөлшекаралық шашырауға орта-

дағы бөліктердің әсері ескеріледі. Ядродағы электронның әсері, ядроның маңындағы үлкен арақашықтықтағы Кулон потенциалына жуықталған кездегі модификацияланған эффективті электрон-иондық потенциалмен сипатталады. Жартылай иондалған плазмада бос электрондар мен иондардың өзара әрекеттесуі байланысқан бос емес күйлерге де байланысты болады. Сол себепті осы мақалада жартылай иондалған плазмадағы еркін электрондардың иондармен әсерлесуінің бос емес басты күйінің әсері ескерілген иондардың экрандалған әрекеттесу потенциалы қарастырылған. Мұндай псевдопотенциалдың қарапайым формасы – бос ядро потенциалы болып есептеледі. Бұл мақалада Фурье кеңістігіндегі күшті тербелістердің әсерін жою үшін потенциалды жұмсақ бос ядро қолданылды. Плазманың әртүрлі параметріндегі ион-иондық әсерлесу потенциалының графиктері көрсетілген. Айтылып отырған үлкен арақашықтықтағы иондардың экрандалған әсерлесу потенциалы экрандалған Юкава потенциалынан әлсіз. Сондықтан үлкен арақашықтықта байланыс параметрін арттырған кезде экрандалу, жылулық иондық толқын ұзындығының артуына байланысты әлсірейді.

Түйінді сөздер: күшті тығыздалған плазма, экрандалу, ион-иондық әсерлесу, тығыз плазма, эффективті потенциал

ION-ION POTENTIAL OF INTERACTION WITH ACCOUNT OF IONIC CORE

Abstract: Warm dense matter is characterized by strongly bound ions and is a strongly bound quantum system. Strongly bound plasma is the subject of active theoretical and experimental studies, such as the study of astrophysical objects and plasma in inertial fusion plants at present. In such a strongly coupled plasma, collective effects (screening effects) occupy an important place. The effective interaction potentials of charged particles are used to take into account screening effects, i.e. take into account the effect of surrounding particles on interparticle scattering in the system. The effect of electron nuclei can be described by the effective electron-ion potential, strongly modified near the nucleus when approaching the Coulomb potential at large distances. In a partially ionized plasma, the interaction between free electrons and ions also depends on occupied bound states. In this regard, in this article, the screened potential of the interaction of ions is considered taking into account the influence of occupied ground states on the interaction of free electrons with ions in a partially ionized plasma. The simplest form for such a pseudopotential is the empty core potential. In this article, to eliminate the influence of strong oscillations in the Fourier space, we used the potential with a soft empty core. Graphs of this potential of ion-ion interaction at various plasma parameters are presented. The considered interaction potential of ions at large distances is shielded weaker than in the case of Yukawa shielding. With an increase in the coupling parameter over long distances, the screening becomes weaker due to an increase in the ion thermal wavelength.

Key words: strongly coupled plasma, screening, ion-ion interaction, dense plasma, effective potential

Введение

Горячая плотная материя (warm dense matter, WDM) – это вещество в равновесном или неравновесном состоянии в режиме температуры и плотности между конденсированным веществом и горячей плазмой. Ее можно определить как состояние, слишком плотное для описания физикой слабосвязанной

плазмы, но слишком горячее для описания физикой конденсированных сред. WDM характеризуется сильно связанными ионами и вырожденными электронами и представляет собой сильно связанную квантовую систему. В этом состоянии потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами и кине-

тическая энергия электронов имеют примерно одинаковую величину, температура имеет порядок энергии Ферми. В настоящее время изучение свойств сильно связанной плазмы представляет большой интерес как для фундаментальных исследований астрофизических объектов и плазмы инерциального термоядерного синтеза, так и для прикладных – в технике.

В такой сильно связанной плазме важное место занимают коллективные эффекты (эффекты экранирования). При расчетах возникают некоторые проблемы с расхождением интегралов столкновения. Для устранения расхождений используется кулоновский потенциал, обрезанный на больших и на коротких расстояниях. С другой стороны, расхождение на малых углах возникает из-за того, что не учитываются эффекты экранирования плазмы на межчастичное рассеяние в системе. Таким образом, другим способом устранения расхождений на больших расстояниях является использование эффективных потенциалов взаимодействия заряженных частиц. Эти потенциалы учитывают влияние окружающих частиц, что приводит к экранированию внешнего потенциала $\varphi(r)$ [1-6].

В частично ионизованной плазме взаимодействие между свободными электронами и ионами зависит также от занятых связанных состояний. Основным эффектом является то, что ядро и валентные электроны должны создать антисимметричное состояние. Таким образом, электроны ядра эффективно блокируют объем, близкий к ядру. Если электроны ядра не рассматриваются в явном виде, то их эффект может быть описан эффективным электрон-ионным потенциалом, сильно модифицированным вблизи ядра во время приближения к кулоновскому потенциалу на больших расстояниях [7].

Наиболее простой формой для такого псевдопотенциала является потенциал пустого ядра [8]:

$$\varphi_{ei}^{ec}(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{r} & \text{for } r > r_{cut} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

Радиус ядра r_{cut} рассматривается здесь как свободный параметр.

Потенциал пустого ядра не единственный возможный вариант для учета частичной ионизации. Жестко отсеченный край может представлять проблему, т.к. он вызывает сильные колебания в пространстве Фурье. Поэтому также используются потенциалы с мягким пустым ядром [9]:

$$\varphi_{ei}(r) = \frac{Ze^2}{r} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^\alpha}{r_{cut}^\alpha}\right) \right] \quad (2)$$

Параметр α контролирует крутизну края остова, r_{cut} – радиус обрезания остова.

Ион-ионный потенциал взаимодействия

В данной работе были использованы следующие безразмерные параметры, характеризующие состояние системы:

$\Gamma = (Ze)^2 / (ak_B T)$ – параметр связи, где T – температура плазмы, k_B – постоянная

Больцмана, $a = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}$ – среднее расстояние

между частицами. Для сильно связанной плазмы $\Gamma > 1$;

$r_s = a/a_B$ – параметр плотности, где $a_B = \hbar^2 / (m_e e^2)$ – радиус Бора. Параметр r_s увеличивается с уменьшением плотности.

Полный (экранированный) потенциал связан с внешним следующей формулой:

$$\hat{O}(k) = \frac{\varphi(k)}{\varepsilon(k)}, \quad (3)$$

где $\Phi(k)$, $\varphi(k)$ – Фурье образы экранированного и внешнего потенциалов, соответственно. Фурье образ определяется как:

$$\tilde{\varphi}_{ei}(k) = \frac{4\pi}{k} \int r \varphi_{ei}(r) \sin(kr) dr \quad (4)$$

где $\varepsilon(k)$ – диэлектрическая функция статического экранирования.

Экранированный потенциал ион-ионного взаимодействия [10]:

$$\hat{O}_{ii}(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\tilde{\varphi}_{ei}(k)|^2 \chi_e(k) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (5)$$

где $\varepsilon^{-1}(k) = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \chi_e(k)$

Результаты

На рисунках 1 и 2 приведены эффективные потенциалы (5) (красные линии), которые учитывают эффект экранирования при $\Gamma = 0.7$ и $r_s = 2$ (рисунок 1 при $\alpha = 1$, рисунок 2 при $\alpha = 100$). На рисунках 3 и 4 приведены эффективные потенциалы (5) (красные линии), которые учитывают эффект экранирования при $\Gamma = 0.5$ и $r_s = 2$ (рисунок 3 при $\alpha = 1$, рисунок 4 при $\alpha = 100$). Эффективные потенциалы (5) сравниваются с потенциалом Юкавы (черные линии), потенциалом Кулона (зеленые линии), эффективным потенциалом, учитывающим квантово-механические эффекты дифракции на малых расстояниях и эффекты экранирования на больших расстояниях, из работы [1] (синие линии).

Как видно из рисунков, вследствие учета коллективных эффектов эффективные потенциалы (5) и [1] для ион-ионного взаимодействия экранированы на больших расстояниях, но при $r \rightarrow 0$ потенциал (5) стремится к бесконечности как $1/r$, в то время как потенциал [1] из-за учета волновой природы электронов конечен на малых расстояниях и его экранировка немного слабее по сравнению с потенциалом (5).

С увеличением параметра связи, то есть с уменьшением температуры, на дальних расстояниях экранирование становится слабее из-за увеличения тепловой длины волны иона.

На рисунке 5 приведены эффективные потенциалы (5) при различных значениях параметра α : $\alpha = 1$ (черная линия), $\alpha = 10$ (красная линия) и $\alpha = 100$ (зеленая линия). С увеличением крутизны края остова усиливаются осцилляции.

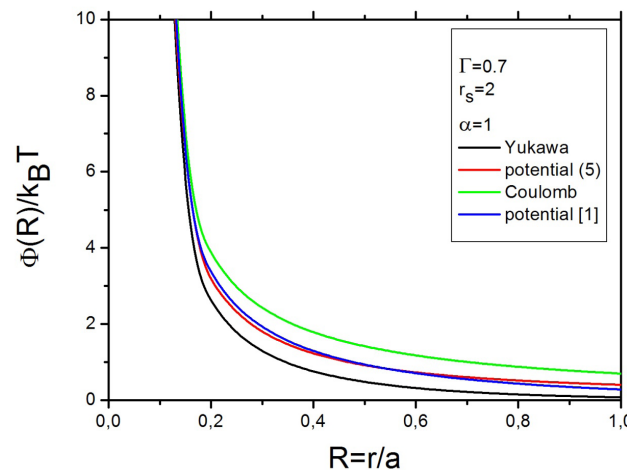


Рис. 1 – Ион-ионные потенциалы взаимодействия при $\Gamma = 0.7$, $r_s = 2$ и $\alpha = 1$

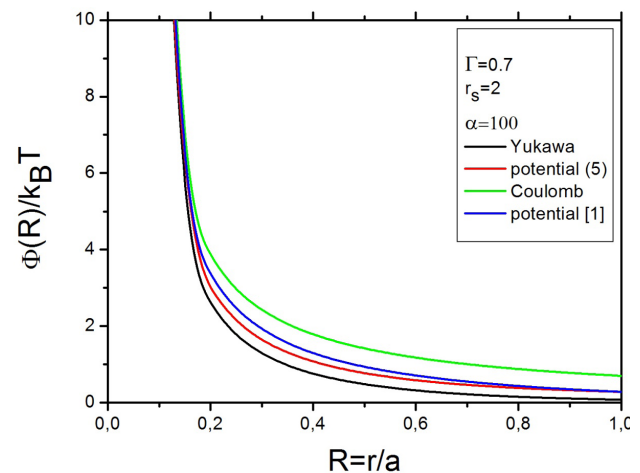


Рис. 2 – Ион-ионные потенциалы взаимодействия при $\Gamma = 0.7$, $r_s = 2$ и $\alpha = 100$

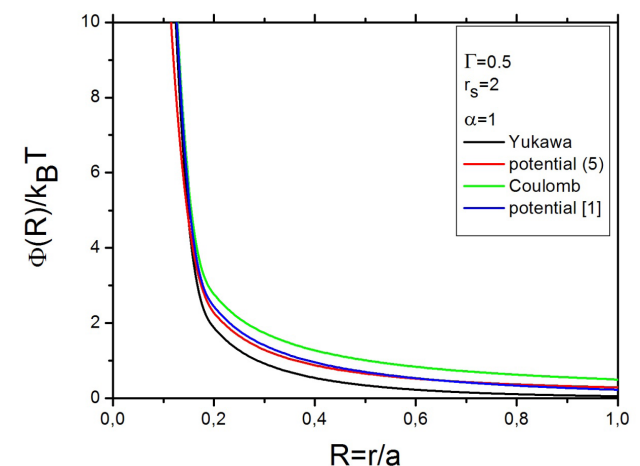


Рис. 3 – Ион-ионные потенциалы взаимодействия при $\Gamma = 0.5$, $r_s = 2$ и $\alpha = 1$

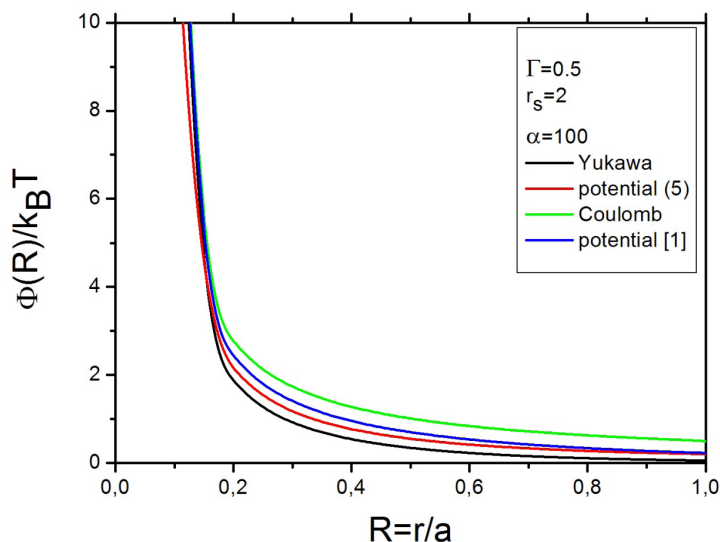


Рис. 4 – Ион-ионные потенциалы взаимодействия при $\Gamma = 0.5$, $r_s = 2$ и $\alpha = 100$

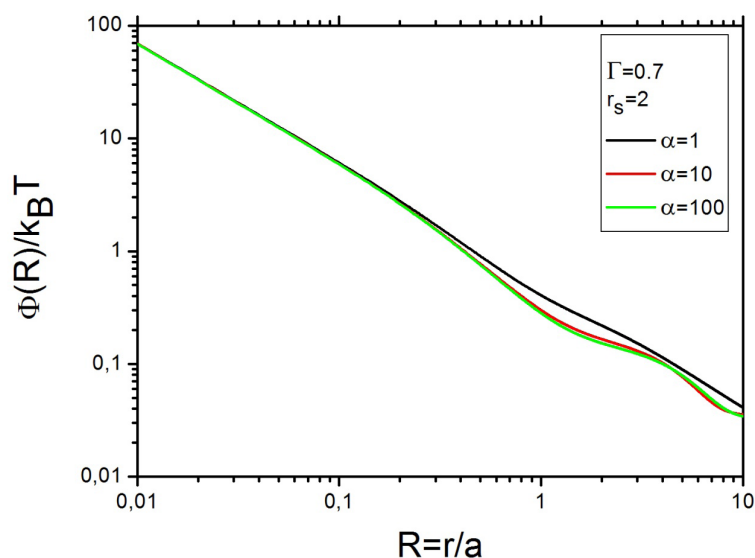


Рис. 5 – Ион-ионные потенциалы взаимодействия при $\Gamma = 0.7$, $r_s = 2$ для разных α

Заключение

В рамках настоящей работы был использован эффективный потенциал взаимодействия ионов в плотной плазме, учитывающий влияние занятых основных состояний на взаимодействие свободных электронов с ионами в частично ионизованной плазме. Рассматриваемый эффективный потенциал

взаимодействия ионов на больших расстояниях экранирован слабее, чем в случае экранирования Юкава. С увеличением параметра связи на дальних расстояниях экранирование становится слабее из-за увеличения тепловой длины волны иона.

Т.Н. Исмагамбетова и М.Т. Габдуллин выражают свою благодарность Ж.А. Молдабекову за обсуждение задачи.

Данная работа была поддержана Министерством образования и науки Казахстана по гранту на проект №AP05134366.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ramazanov, T.S. and Dzhumagulova, K.N. (2002) "Effective screened potentials of strongly coupled semiclassical plasma", *Physics of Plasmas*, vol. 9, pp. 3758.
2. DeWitt, H.E., Slattery, W.L. and Chabrier, G. (1996) "Numerical simulation of strongly coupled binary ionic plasmas", *Physica B*, vol. 228, pp. 21.
3. Pierleoni, C., Ceperley, D.M., Bernu, B. and Magro, W.R. (1994) "Equation of State of the hydrogen plasma by path integral Monte Carlo simulation", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, pp. 2145.
4. Penman, J.I., Clerouin, J.G. and Zerah, P.G. (1995) "Equation of state of a hydrogen plasma by density functional molecular dynamics", *Phys. Rev. E*, vol. 51, pp. R5224.
5. Reinholz, H., Redmer, R. and Nagel, S. (1995) "Thermodynamic and transport properties of dense hydrogen plasma", *Phys. Rev. E*, vol. 52, pp. 5368-5386.
6. Ramazanov, T.S., Baimbetov, N.F., Bekenov, M.A., Redmer, R. and Röpke, G. (1998) *Strongly Coupled Coulomb Systems*, Plenum, New York.
7. Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. (1976) *Solid State Physics*, Holt, Rinehart, Winston, New York.
8. Ashcroft, N.W. and Stroud, D. (1978) "Theory of the Thermodynamics of Simple Liquid Metals", *Solid State Phys.*, vol. 33, pp. 1.
9. Gericke, D.O., Vorberger, J. and Wünsch, K. (2010) "Screening of ionic cores in partially ionized plasmas within linear response", *Phys. Rev. E*, vol. 81, pp. 065401(R).
10. Hansen, J.-P. and McDonald, I.R. (2000) *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, London.