

# СХОДИМОСТЬ МД-ЦЕПИ И АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ СКОРОСТЕЙ ЭЛЕКТРОНОВ ПЛОТНОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

Г.Н. Нигметова

*Каспийский государственный университет технологий и инжиниринга  
им. Ш.Есенова, г.Актау*

*Казахский национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы*

Методом молекулярной динамики исследованы микроскопические (динамические) свойства плотной квазиклассической (слабовыврожденной) плазмы. Использована квазиклассическая модель неидеальной плазмы. Анализируются потенциальные части МД-цепи и полученные автокорреляционные функции скоростей электронов плотной квазиклассической плазмы.

Для адекватного описания широкого круга явлений в природе и в лабораторных условиях, связанных с неидеальной плазмой, необходимы достоверные сведения о микроскопических и транспортных свойствах системы. На настоящем этапе развития технологии конструкционных материалов возможности экспериментальной генерации плотной плазмы ограничиваются значениями  $\approx 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ , тогда как плотность плазмы, к примеру, астрофизических объектов составляет  $\approx (10^{24} \div 10^{27}) \text{ см}^{-3}$ . В связи с этим, единственными методами изучения физических свойств сверхплотной плазмы являются методы компьютерного моделирования (Монте-Карло, молекулярной динамики, «квазичастиц» и т.п.). В настоящей работе применяется метод молекулярной динамики.

В настоящей работе рассмотрена полностью ионизованная, сильносвязанная водородная плазма. Плотность числа частиц  $n = n_e = n_i \cong (10^{22} \div 2 \cdot 10^{26}) \text{ см}^{-3}$  и температура системы  $T \cong (5 \cdot 10^4 \div 10^6) \text{ К}$ . Безразмерные параметры, характеризующие систему, следующие: параметр связи  $\Gamma = e^2 / ak_B T$ ; параметр плотности  $r_s = a / a_B$ ; параметр вырождения  $\Theta = k_B T / E_F \approx 0,54 \cdot r_s / \Gamma$ , где  $e, a, a_B, E_F$  - заряд, среднее расстояние между частицами, радиус Бора и энергия Ферми соответственно. При указанных параметрах системы различают сильносвязанную плазму с частично-вырожденной электронной компонентой. Поэтому в данной работе  $\Gamma \geq 1$ ;  $\Theta \geq 1$ ;  $T > 13,6$  эВ.

Использована псевдопотенциальная модель квазиклассической плазмы, согласно которой предполагается, что частицы плотной плазмы взаимодействуют между собой посредством эффективного потенциала, предложенного в [1].

На рисунках 1,2 приведены типичные «потенциальные части» молекулярно-динамического моделирования («контрольные карты») для разных значений параметра связи (неидеальности). Отметим, что на всех контрольных картах достаточно четко видны два характерных участка: «нестационарный» и «стационарный», свидетельствующий о выходе системы на равновесное состояние с минимальной потенциальной энергией. Причем, с увеличением параметра неидеальности среднее значение этой минимальной потенциальной энергии увеличивается, что свидетельствует об уплотнении системы. Заметим, что относительные флуктуации контрольной карты не превышают  $\pm 1/\sqrt{N}$ , в то же время с увеличением  $\Gamma$  относительные флуктуации "стационарного" участка контрольной карты уменьшаются, что, по-видимому, связано с тем, что увеличение связи в системе (увеличение неидеальности) ведет к "подавлению" тепловых флуктуаций.

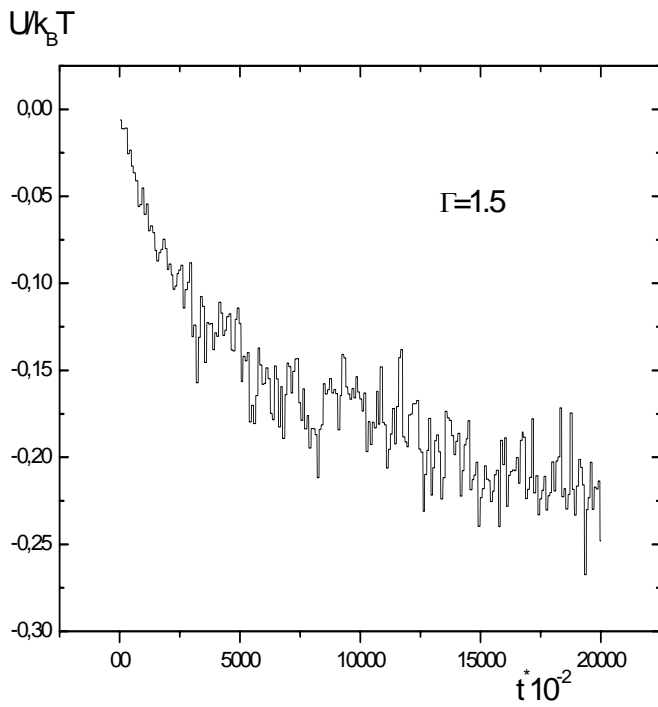


Рис. 1. «Потенциальная часть» МД-цепи («контрольная карта») молекулярно-динамического моделирования плотной квазиклассической плазмы при значении параметра плотности  $r_s = 5$

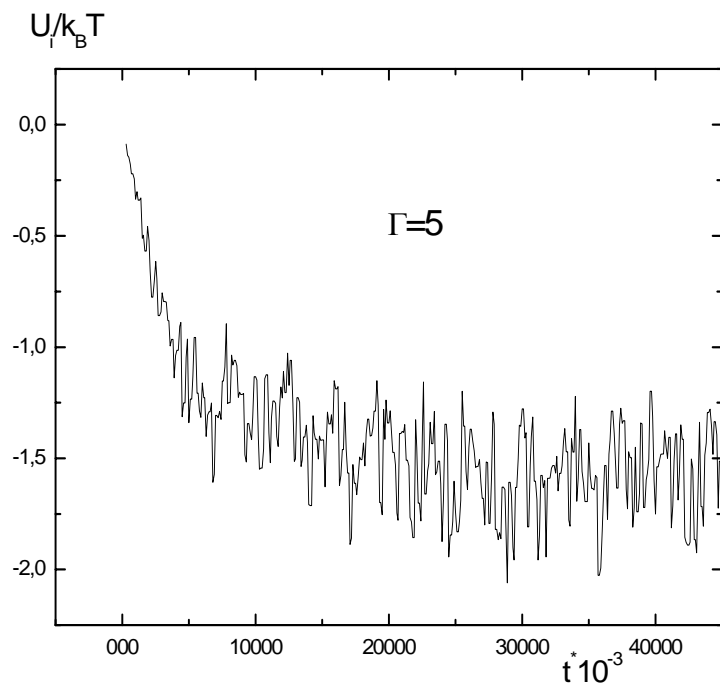


Рис. 2. «Потенциальная часть» МД-цепи («контрольная карта») молекулярно-динамического моделирования плотной квазиклассической плазмы при значении параметра плотности  $r_s = 3$ .

Автокорреляционные функции скоростей электронов (в ед.  $[v(0)]^2$ ) показаны на рисунках 3-6. Отметим неплохую сходимость автокорреляционных функций при различных

начальных конфигурациях (рисунки 3,5). Флуктуации на зависимостях автокорреляторов можно отнести в счет статистических погрешностей и составляют  $\sim 1/\sqrt{N}$ . С уменьшением параметра связи, сходимость автокорреляторов ухудшается (сплошная кривая на рисунке 4). Данный факт обусловлен уменьшением частоты столкновений частиц в слабонеидеальной плазме. Полученные автокорреляционные функции скоростей позволяют вычислить транспортные характеристики неидеальной плазмы согласно теории линейного отклика (диффузия, электропроводность, оптические свойства и др.)

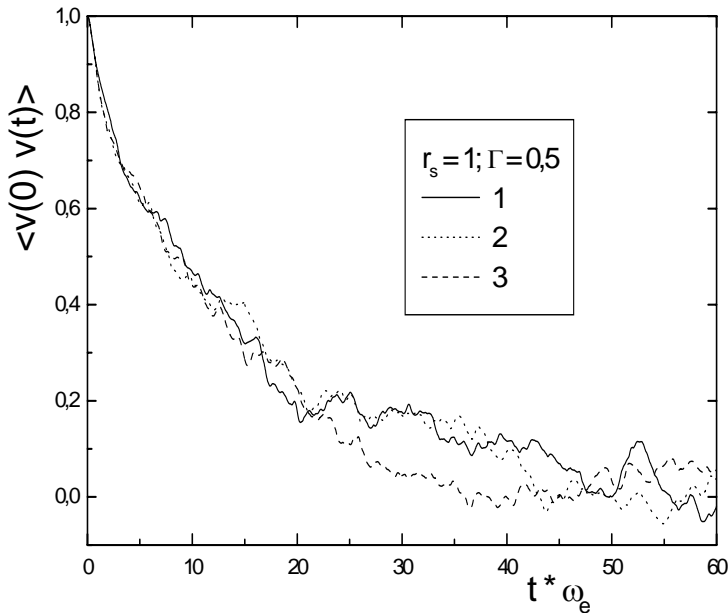
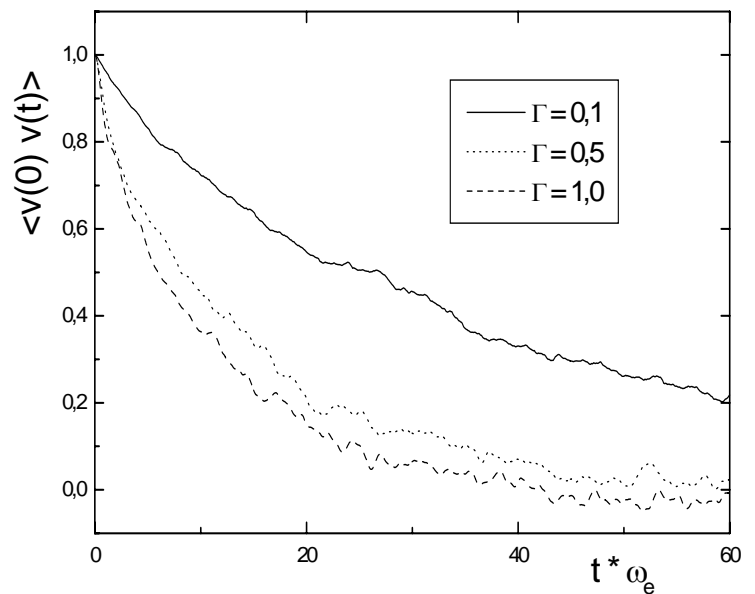


Рис.3. Автокорреляционные функции скоростей электронов плотной квазиклассической плазмы. 1, 2, 3 - соответствуют различным равновесным конфигурациям ионов

Рис.4. Усредненные по равновесным конфигурациям ионов автокорреляционные функции скоростей электронов плотной квазиклассической плазмы при различных значениях параметра связи  $M = 3$ .



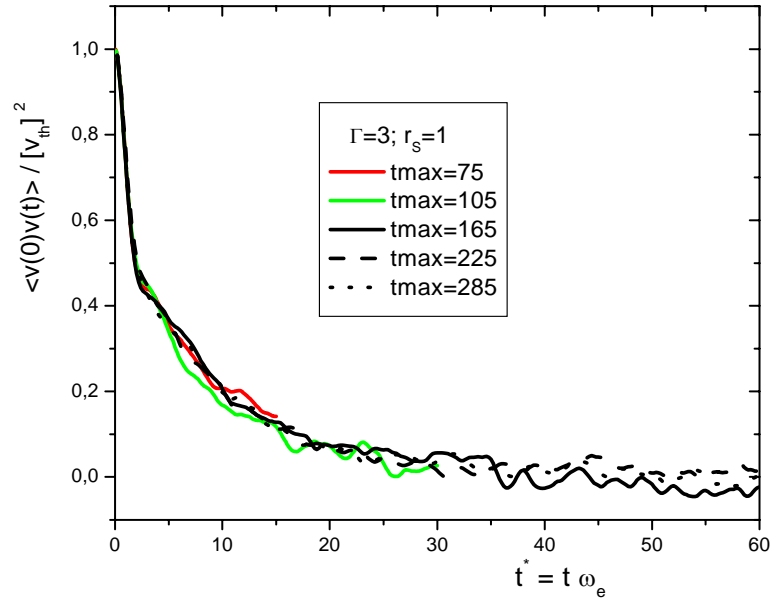


Рис. 5. Автокорреляционные функции скоростей электронов плотной квазиклассической плазмы. Кривые соответствуют различным равновесным конфигурациям ионов и длинам МД-цепи

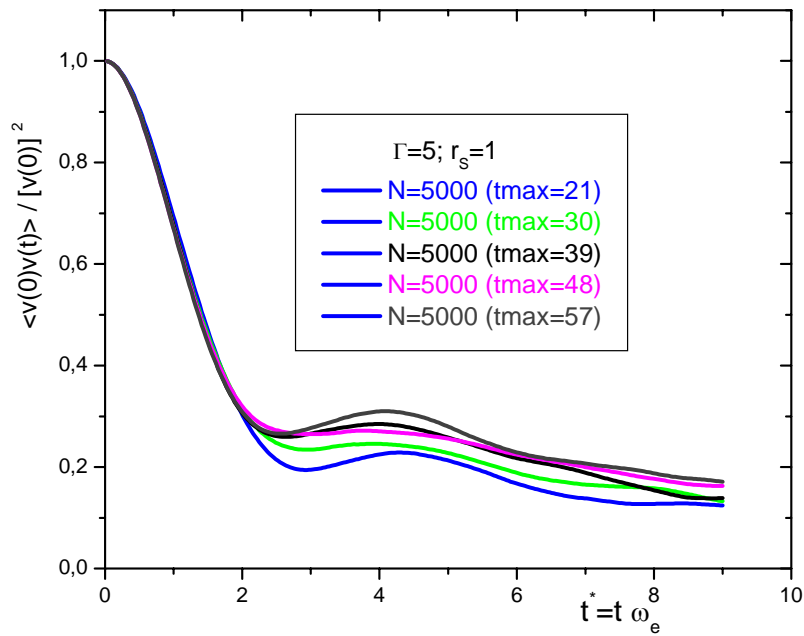


Рис. 6. Автокорреляционные функции скоростей электронов плотной квазиклассической плазмы. Кривые соответствуют различным длинам МД-цепи

Заметим, что полученные результаты были сравнены с результатами работ других авторов. Из рисунков 3-6 видно, что при  $\Gamma < 5$  автокорреляционные функции скоростей частиц плазмы монотонны. Но начиная с  $\Gamma = 5$  кривая АФ скорости имеет явный пик при  $t^* \approx 4$  (рисунок 6). Такое поведение автокорреляторов скоростей при  $\Gamma = 5$ , не зависит от времен усреднений и от числа частиц в базовой ячейке  $N$ . Этот факт можно объяснить появлением коллективных эффектов в плотной плазме.

Таким образом, в настоящей работе проведено компьютерное моделирование микроскопических (динамических) свойств плотной квазиклассической слабовырожденной плазмы методом молекулярной динамики. Показана принципиальная пригодность и корректность модели квазиклассической неидеальной плазмы для моделирования динамических и транспортных свойств системы.

### **Литература**

1. F.B.Baimbetov, M.A.Bekenov, T.S.Ramazanov. Effective potential of a semiclassical hydrogen plasmas. Phys.Lett.A. vol.197 (1995) 157 - 158.

## **ТЫҒЫЗ КВАЗИКЛАССИКАЛЫҚ ПЛАЗМА ЭЛЕКТРОНДАРЫНЫҢ ЖЫЛДАМДЫҚТАРЫНЫҢ АВТОКОРРЕЛЯЦИАЛЫҚ ФУНКЦИЯЛАРЫ ЖӘНЕ МД ТІЗБЕГІНІҢ ЖИНАҚТЫЛЫҒЫ**

**Г.Н. Нығметова**

Тығыз квазиклассикалық плазманың микроскопиялық қасиеттері молекулалық динамика әдісі негізінде зерттелген. Идеал емес плазманың квазиклассикалық моделі қолданылған. Тығыз квазиклассикалық плазма электрондары жылдамдықтарының автокорреляциялық функциялары және МД тізбегінің жинақтылығы талқыланды.

## **CONVERGENCE OF MD-CHAIN AND VELOCITY AUTOCORRELATION FUNCTIONS OF ELECTRONS FOR A DENSE SEMICLASSICAL PLASMA**

**G.N. Nigmatova**

The microscopic (dynamical) properties of a dense semiclassical plasma were investigated by molecular dynamics method. The semiclassical model of nonideal plasma was used. The potential part of MD-chain and velocity autocorrelation functions of electrons for semiclassical plasma