

**Исмагамбетова Т.Н.<sup>1</sup>, Габдуллин М.Т.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Казахстанско-Британский технический университет,  
Казахстан, г. Алматы, e-mail: gabdullin@physics.kz

## **ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ПЛОТНОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ**

Были исследованы структурные свойства плотной неидеальной водородной плазмы. Потенциалы взаимодействия частиц, учитывающие квантово-механические эффекты дифракции и симметрии, были использованы в качестве модели взаимодействия. Электрон-электронные парные корреляционные функции были получены при решении интегрального уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении на основе потенциалов взаимодействия. Квантово-механический эффект симметрии рассматривался для разных направлений спинов электронов. Эффект симметрии учитывает принцип исключения Паули. Влияние эффекта симметрии как квантово-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме. Антипараллельное направление электронных спинов увеличивает вероятность нахождения электронов на расстоянии  $R$  друг от друга, параллельное направление уменьшает эту вероятность из-за запрета на присутствие двух электронов с одинаковыми спинами в одном и том же состоянии. Результаты данной работы были сравнены с результатами метода классического сопоставления ("classical mapping"). Основная идея классического сопоставления состоит в том, чтобы установить взаимосвязь между квантовой и эталонной классической системами, такую, чтобы структура классической системы была такая же, как у рассматриваемой квантовой системы. Результаты данной работы показывают хорошее согласие с результатами метода классического сопоставления в гиперцепном приближении с мостиковой функцией и компьютерного моделирования.

**Ключевые слова:** неидеальная плазма, парные корреляционные функции.

Ismagambetova T.N.<sup>1</sup>, Gabdullin M.T.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>IETP, al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: gabdullin@physics.kz

### **Pair correlation functions of a dense hydrogen plasma**

The structural properties of a dense non-ideal hydrogen plasma were investigated. The interaction potentials of particles, taking into account the quantum-mechanical effects of diffraction and symmetry, were used as an interaction model. The electron-electron pair correlation functions were obtained by solving the Ornstein-Zernike integral equation in the hypernetted-chain approximation based on the interaction potentials. The quantum mechanical symmetry effect was considered for different directions of electron spins. The symmetry effect takes into account the Pauli exclusion principle. The effect of the symmetry effect as a quantum mechanical effect is more pronounced at small distances and in a denser plasma. The antiparallel direction of electron spins increases the probability of finding electrons at a distance  $R$  from each other, the parallel direction reduces this probability due to the prohibition of the presence of two electrons with identical spins in the same state. The results of this work were compared with the results of the classical comparison method ("classical mapping"). The main idea of the classical comparison is to establish the relationship between the quantum and reference classical systems, such that the structure of the classical system is the same as that of the quantum system in question. The results of this paper show good agreement with the results of the classical mapping in the hypernetted-chain approximation with the bridge function and computer simulation.

**Key words:** non-ideal plasma, pair correlation functions.

Исмагамбетова Т.Н.<sup>1</sup>, Габдуллин М.Т.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ЭТФҒЗИ, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,  
Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Қазақстан-Британ техникалық университеті,  
Қазақстан, Алматы қ., e-mail: gabdullin@physics.kz

### Тығыз сутекті плазманың жұп корреляциялық функциялары

Тығыз идеал емес сутекті плазманың құрылымдық қасиеттері зерттелді. Дифракция мен симметрияның кванттық-механикалық эффектiлерiн ескеретiн бөлшектердiң әсерлесу потенциалдары әсерлесу үлгiсi ретiнде қолданылды. Электрон-электрон жұп корреляциялық функциялары әсерлесу потенциалдарының негiзiнде гипперцепты жуықтаудағы Орнштейн-Цернике интегралды теңдеуiн шешу барысында алынды. Симметрияның кванттық-механикалық эффектiсi электрон спиндарының әртүрлi бағыттары үшiн қарастырылды. Симметрия эффектiсi Паулидiң шығарып тастау принципiн ескередi. Симметрия эффектiсiнiң кванттық-механикалық эффект ретiндегi әсерi жауын қашықтықтарда және тығыз плазмада жақсы көрiнедi. Электрон спиндарының параллель емес бағыттары электрондардың бiр-бiрiнен R қашықтықта болу мүмкiндiгiн үлкейтедi, ал параллель бағыт бұл мүмкiндiктi кiшiрейтедi, себебi бiр күйде спиндары бiрдей екi электрон болуына тыйым салынған. Берiлген жұмыстың нәтижелерi классикалық салыстыру әдiсiнiң (“classical mapping”) нәтижелерiмен салыстырылған. Классикалық салыстырудың негiзгi ойы – кванттық және эталондық классикалық жүйелердiң арасында классикалық жүйенiң құрылымы қарастырылып отырған кванттық жүйенiкiмен бiрдей болатындай байланыс орнату. Берiлген жұмыстың нәтижелерi көпiрлiк функциясы бар гипперцепты жуықтаудағы классикалық салыстыру әдiсi мен компьютерлiк модельдеу нәтижелерiмен жақсы ұйқастық көрсетедi.

**Түйiн сөздер:** идеал емес плазма, жұптық корреляциялық функция.

#### 1. Введение

В данной работе рассматривается плотная водородная плазма, представляющая значительный интерес как в теоретическом, так и в практическом плане, например, неидеальная плазма, встречающаяся в термоядерных реакторах. В плотной или неидеальной плазме значительную роль играют межчастичные взаимодействия. В такой плазме среднее межчастичное расстояние

имеет один порядок с тепловой длиной волной частиц. В плотной плазме высокая вероятность столкновения с таким максимальным сближением, что становится важным учет волновой природы сталкивающихся частиц.

Потенциалы взаимодействия [1-3], используемые в этой статье, учитывают квантово-механические эффекты дифракции и симметрии на малых расстояниях:

$$u_{ab}(r) = \frac{e_a e_b}{r} \left( 1 - th \left( \sqrt{2} \frac{\lambda_{ab}^2}{a_B^2 + br^2} \right) e^{-th \left( \frac{\sqrt{2} \lambda_{ab}^2}{a_B^2 + br^2} \right)} \right) \left( 1 - e^{-\frac{r}{\lambda_{ab}}} \right) - \delta_{ae} \delta_{be} k_B T \ln \left( 1 - \frac{1}{2} e^{-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2}} \right) \quad (1)$$

где  $e_a e_b$  – заряд частиц а и b,  $\lambda_{ab} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m_{ab} k_B T}}$

– тепловая длина волны де Бройля,

$m_{ab} = \frac{m_a m_b}{(m_a + m_b)}$  – приведенная масса,

$r_D = \left( \frac{k_B}{4\pi e^2 \sum_j n_j Z_j^2} \right)^{1/2}$  – радиус Дебая, также

безразмерные параметры:  $\Gamma = \frac{(Ze)^2}{ak_B T}$  – параметр

связи,  $r_s = \frac{a}{a_B}$  – параметр плотности,

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

электронами,  $a_B$  – радиус Бора. Первое слагаемое учитывает эффект дифракции, второе –

эффект симметрии (усредненное направление электронных спинов).

Параметр вырождения для электронной компоненты определяется следующим выражением:

$$\Theta = \frac{k_B T}{E_F} = 2 \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} Z^{\frac{5}{3}} \frac{r_s}{\Gamma}, \quad (2)$$

Где  $E_F$  – энергия Ферми электронов,  $\Theta \gg 1$  – классическая плазма,  $\Theta \geq 1$  – слабо вырожденная плазма,  $\Theta < 1$  – вырожденная плазма.

Для учета разных направлений спина электрона использовалась следующая формула вместо второго слагаемого в формуле (1):

$$U_{ee,0}^{S(\Gamma)}(r) = -k_B T \ln \left( 1 \pm \exp \left( -\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2} \right) \right), \quad (3)$$

где  $S = 1$  соответствует параллельным спином,  $S = 0$  – антипараллельным спином.

## 2. Парные корреляционные функции

Парные корреляционные функции  $g(r)$  были рассчитаны на основе интегрального уравнения Орнштейна-Цернике [4]:

$$h(\vec{r}) = C(\vec{r}) + n \int C(\vec{r}_3 - \vec{r}_1) h(\vec{r}_3 - \vec{r}_2) d\vec{r}_3, \quad (4)$$

в гиперцепном приближении (HNC):

$$C_{HNC}(\vec{r}) = h(\vec{r}) - \ln g(\vec{r}) - \frac{u(\vec{r})}{k_B T}, \quad (5)$$

где  $h(\vec{r}) = g(\vec{r}) - 1$  – полная корреляционная функция,  $C(\vec{r})$  – прямая корреляционная функция,  $u(\vec{r})$  – потенциал взаимодействия. Уравнения (4) и (5) были рассчитаны численными методами.

На рисунке 1 представлены электрон-электронные потенциалы взаимодействия, полученные в данной работе, в сравнении с [5]. На рисунке 1 показаны графики потенциалов взаимодействия при различных значениях параметра

вырождения  $t = \theta = 0$  (черная), 0.1 (красные квадратики), 1 (синие кружочки), 10 (сиреневые квадратики). Синяя ( $t = \theta = 1$ ) и бирюзовая ( $t = \theta = 10$ ) линии – результаты на основе потенциала (1) при усредненном направлении электронных спинов.

На рисунках 2-4 представлены графики электрон-электронных парных корреляционных функций, рассчитанных на основе потенциала (1), в сравнении с работой [6]. На рисунке 2 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s = 1$ ,  $\Gamma = 0.5$ . Сплошные линии – результаты классического сопоставления (“classical mapping”) в гиперцепном приближении с мостиковой функцией [7-10], полученной в [11] на основе [12-15] (HNCB), точечные линии – результаты квантового моделирования Монте-Карло (QMC). Черные линии – для параллельных спинов, красные линии – для антипараллельных спинов. На рисунке 3 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s = 1$ ,  $\Gamma = 0.5$  и  $r_s = 6$ ,  $\Gamma = 3$ . Сплошные линии – HNCB, пунктирные линии – HNC [16], точечные линии – QMC [17]. Черные линии –  $r_s = 1$ , красные линии –  $r_s = 6$ . Бирюзовая и сиреневая линии – на основе потенциала (1) при  $r_s = 1$  и  $r_s = 6$ . На рисунке 4 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s = 1$ ,  $\Gamma = 0.07$  и  $r_s = 6$ ,  $\Gamma = 0.4$ . Сплошные линии – HNCB, пунктирные линии – HNC, точечные линии – QMC. Черные линии –  $r_s = 1$ , красные линии –  $r_s = 6$ . Зеленая и синяя линии – на основе потенциала (1) при  $r_s = 1$  и  $r_s = 6$ .

На рисунках 5-6 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции, полученные в данной работе, в сравнении с [18].

На рисунке 5 представлены электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s = 6$ ,  $t = \theta = 0.5$  (черная линия), 1 (красная линия), 4 (зеленая линия), 8 (сиреневая линия). Сплошными линиями обозначены результаты классического сопоставления в гиперцепном приближении с мостиковой функцией, квадратиками – компьютерного моделирования Монте-Карло (PIMC). На рисунке 6 показаны электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s = 6$ ,  $t = \theta = 0.5$  (черная линия), 1 (красная линия), 4 (зеленая линия), 8 (сиреневая линия). Сплошными линиями обозначены результаты классического сопоставления в гиперцепном приближении с мостиковой функцией, кружочками – классического сопоставления (PDW). Сплошная синяя и бирюзовая линии обозначают электрон-

электронные парные корреляционные функции на основе потенциала (1) при  $t=\theta=4$  и 8.

Эффект симметрии учитывает принцип Паули, который запрещает одновременное присутствие двух одинаковых частиц с полужелым спином (в данном случае электронов) в одном квантовом состоянии, что уменьшает вероятность нахождения частиц на расстоянии  $r$  друг от друга. Влияние эффекта симметрии как квантово-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме.

Результаты данной работы показывают хорошее согласие с результатами метода классического сопоставления ("classical mapping") в гиперцепном приближении с мостиковой функцией и компьютерного моделирования.

Основная идея классического сопоставления состоит в том, чтобы установить взаимосвязь между квантовой и эталонной классической системами, такую, чтобы структура классической системы была такая же, как у рассматриваемой квантовой системы. С помощью потенциала взаимодействия, учитывающего квантовые эффекты, мы можем решить корреляционные функции эталонной классической системы, используя классические методы многих тел, а именно теории жидких состояний. Этот метод, предложенный Дхарма-Варданой и др. [19], классический метод сопоставления, был успешно применен к различным электронным системам с небольшими вычислительными затратами [20-25].

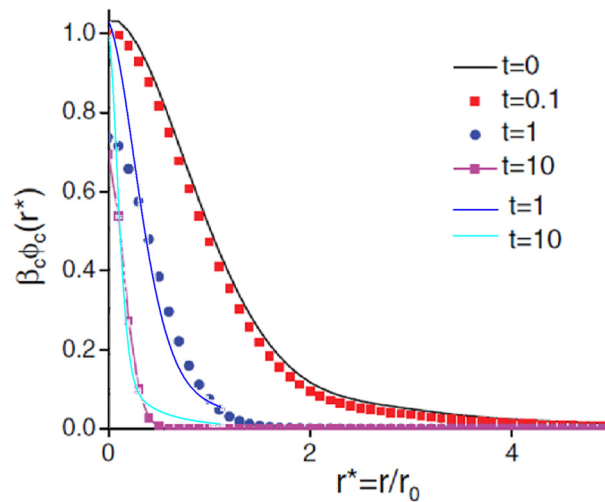


Рисунок 1 – Парный потенциал Паули для  $t=\theta=0, 0.1, 1, 10$

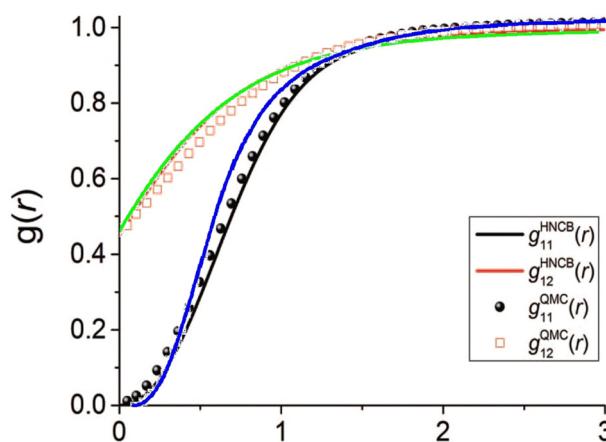


Рисунок 2 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s=1, \Gamma=0.5$

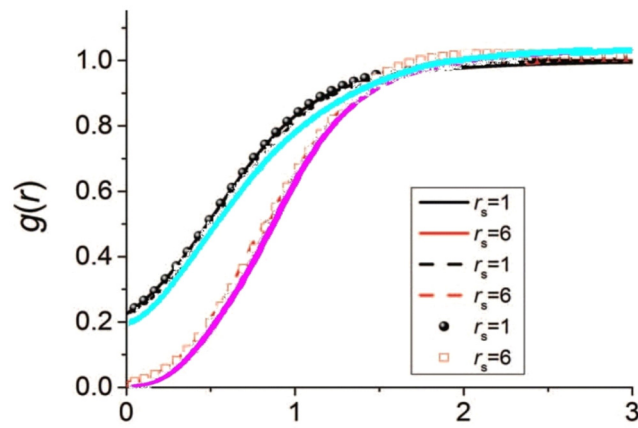


Рисунок 3 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s=1, \Gamma=0.5$  и  $r_s=6, \Gamma=3$

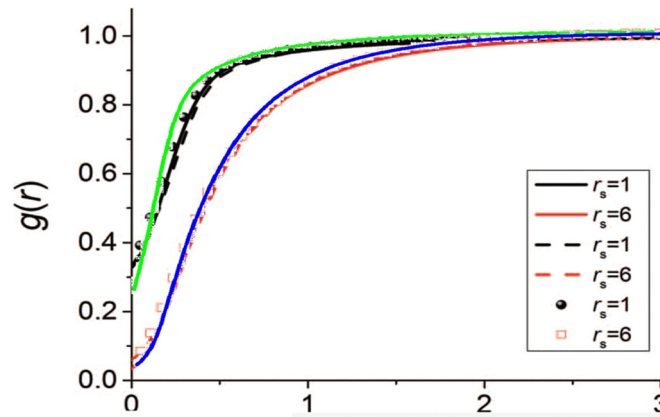


Рисунок 4 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s=1, \Gamma=0.07$  и  $r_s=6, \Gamma=0.4$

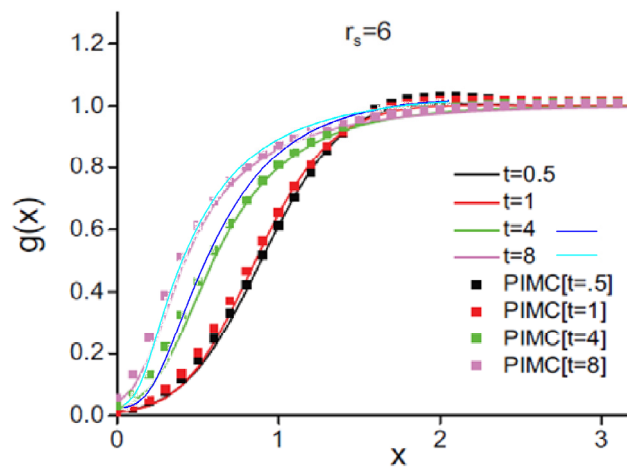


Рисунок 5 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s=6, t=0.5, 1, 4, 8$

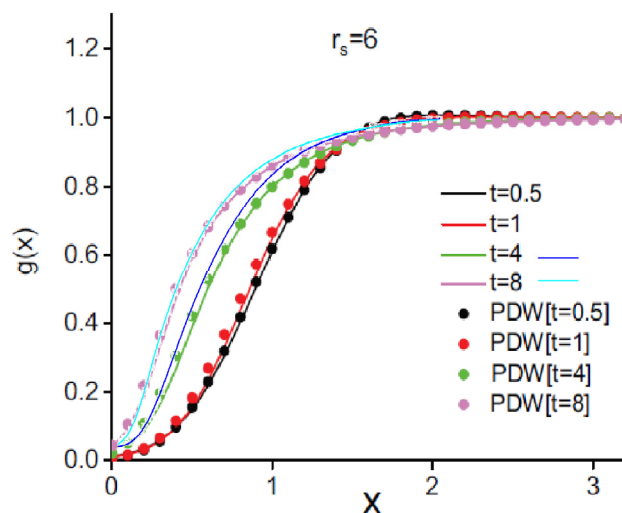


Рисунок 6 – Электрон-электронные парные корреляционные функции при  $r_s=6$ ,  $t=0.5, 1, 4, 8$

### 3. Выводы

Эффект симметрии учитывает принцип исключения Паули. Влияние эффекта симметрии как квантово-механического эффекта более выражено на малых расстояниях и в более плотной плазме. Антипараллельное направление электронных спинов увеличивает вероятность нахождения электронов на расстоянии  $R$  друг от

друга, параллельное направление уменьшает эту вероятность из-за запрета на присутствие двух электронов с одинаковыми спинами в одном и том же состоянии.

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

### Литература

- 1 Moldabekov Zh.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Pair Interaction Potential of Particles for Two-Component Plasma // Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 207-210.
- 2 Ramazanov T.S., Moldabekov Zh.A., Gabdullin M.T., and Ismagambetova T.N. Interaction potentials and thermodynamic properties of two component semiclassical plasma // Phys. Plasmas. – 2014. – Vol. 21. – P. 012706.
- 3 Gabdullin M.T., Ramazanov T.S., Muratov M.M., Ismagambetova T.N., Akhtanova G.B., and Goree J.A. Structural Characteristics and Equation of State of the Complex Plasmas // Contrib. Plasma Phys. – 2015. – Vol. 55 (5). – P. 366-372.
- 4 Goodstein D.L. States of Matter. – Dover publications, Inc., 2002. – 512 p.
- 5 Dutta S., and Dufty J. Classical representation of a quantum system at equilibrium: Theory // Phys. Rev. E. – 2013. – Vol. 87. – P. 032101.
- 6 Liu Y., and Wu J. A bridge-functional-based classical mapping method for predicting the correlation functions of uniform electron gases at finite temperature // The Journal of Chemical Physics. – 2014. – Vol. 140. – P. 084103.
- 7 Du Q. H., Beglov D., and Roux B. Solvation Free Energy of Polar and Nonpolar Molecules in Water: An Extended Interaction Site Integral Equation Theory in Three Dimensions // J. Phys. Chem. B. – 2000. – Vol. 104. – P. 796-805.
- 8 Ballone P., Pastore G., Galli G., and Gazzillo D. Additive and non-additive hard sphere mixtures // Mol. Phys. – 1986. – Vol. 59. – P. 275-290.
- 9 Duh D. M. and Henderson D. Integral equation theory for Lennard-Jones fluids: The bridge function and applications to pure fluids and mixtures // J. Chem. Phys. – 1996. – Vol. 104. – P. 6742.
- 10 Kovalenko A. and Hirata F. Hydration free energy of hydrophobic solutes studied by a reference interaction site model with a repulsive bridge correction and a thermodynamic perturbation method // J. Chem. Phys. – 2000. – Vol. 113. – P. 2793.
- 11 Zhao S., Feng P., and Wu J. A liquid-state theory for electron correlation functions and thermodynamics // Chem. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 556. – P. 336-340.
- 12 Rosenfeld Y. Free-Energy Model for the Inhomogeneous Hard-Sphere Fluid Mixture and Density-Functional Theory of Freezing // Phys. Rev. Lett. – 1989. – Vol. 63. – P. 980.
- 13 Kierlik E. and Rosinberg M. L. Density-functional theory for inhomogeneous fluids: Adsorption of binary mixtures // Phys. Rev. A. – 1991. – Vol. 44. – P. 5025.
- 14 Lowen H. Melting, freezing and colloidal suspensions // Phys. Rep.-Rev. Sec. Phys. Lett. – 1994. – Vol. 237. – P. 249-324.

- 15 Yu Y.X. and Wu J.Z. Structures of hard-sphere fluids from a modified fundamental-measure theory // *J. Chem. Phys.* – 2002. – Vol. 117. – P. 10156.
- 16 Dutta S. and Dufty J. Uniform electron gas at warm, dense matter conditions // *Europhys. Lett.* – 2013. – Vol. 102. – P. 67005.
- 17 Brown E.W., Clark B.K., DuBois J.L., and Ceperley D.M. Path-Integral Monte Carlo Simulation of the Warm Dense Homogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110. – P. 146405.
- 18 Dutta S., and Dufty J. Classical representation of a quantum system at equilibrium: Applications // *Phys. Rev. E.* – 2013. – Vol. 87. – P. 032102.
- 19 Dharma-Wardana M. W. C., and Perrot F. A simple classical mapping of the spin-polarized quantum electron gas: distribution functions and local field corrections // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84. – P. 959.
- 20 Dharma-Wardana M.W.C. Spin and temperature dependent study of exchange and correlation in thick two-dimensional electron layers // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 72. – P. 125339.
- 21 Dharma-Wardana M.W.C., Perrot F. Structure of the local-field factor of the 2D electron fluid. Possible evidence for correlated scattering of electron pairs // *Europhys. Lett.* – 2003. – Vol. 63. – P. 660.
- 22 Dharma-Wardana M.W.C., Murillo M.S. Pair-distribution functions of two-temperature two-mass systems: Comparison of molecular dynamics, classical-map hypernetted chain, quantum Monte Carlo, and Kohn-Sham calculations for dense hydrogen // *Phys. Rev. E.* – 2008. – Vol. 77. – P. 026401.
- 23 Dharma-Wardana M.W.C., Perrot F. Equation of state and the Hugoniot of laser shock-compressed deuterium // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66. – P. 14110.
- 24 Dharma-Wardana M. W. C. The classical-map hyper-netted-chain (CHNC) method and associated novel density-functional techniques for warm dense matter // *Int. J. Quantum Chem.* – 2012. – Vol. 112. – P. 53.
- 25 Perrot F. and Dharma-Wardana M. W. C. Spin-polarized electron liquid at arbitrary temperatures: Exchange-correlation energies, electron-distribution functions, and the static response functions // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol. 62. – P. 16536.

#### References

- 1 Zh.A. Moldabekov, T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, *Contrib. Plasma Phys.* 52, 207-210 (2012).
- 2 T.S. Ramazanov, Zh.A. Moldabekov, M.T. Gabdullin, and T.N. Ismagambetova, *Phys. Plasmas* 21, 012706 (2014).
- 3 M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, M.M. Muratov, T.N. Ismagambetova, G.B. Akhtanova, and J.A. Goree, *Contrib. Plasma Phys.* 55 (5), 366-372 (2015).
- 4 D.L. Goodstein *States of Matter* (Dover publications, Inc., 2002), 512 p.
- 5 S. Dutta, and J. Dufty, *Phys. Rev. E* 87, 032101 (2013).
- 6 Y. Liu, and J. Wu, *The Journal of Chemical Physics* 140, 084103 (2014).
- 7 Q. H. Du, D. Beglov, and B. Roux, *J. Phys. Chem. B* 104, 796 (2000).
- 8 P. Ballone, G. Pastore, G. Galli, and D. Gazzillo, *Mol. Phys.* 59, 275 (1986).
- 9 D. M. Duh and D. Henderson, *J. Chem. Phys.* 104, 6742 (1996).
- 10 A. Kovalenko and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* 113, 2793 (2000).
- 11 S. Zhao, P. Feng, and J. Wu, *Chem. Phys. Lett.* 556, 336 (2013).
- 12 Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. Lett.* 63, 980 (1989).
- 13 E. Kierlik and M. L. Rosinberg, *Phys. Rev. A* 44, 5025 (1991).
- 14 H. Lowen, *Phys. Rep.-Rev. Sec. Phys. Lett.* 237, 249 (1994).
- 15 Y.X. Yu and J.Z. Wu, *J. Chem. Phys.* 117, 10156 (2002).
- 16 S. Dutta and J. Dufty, *Europhys. Lett.* 102, 67005 (2013).
- 17 E. W. Brown, B. K. Clark, J. L. DuBois, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* 110, 146405 (2013).
- 18 S. Dutta, and J. Dufty, *Phys. Rev. E* 87, 032102 (2013).
- 19 M. W. C. Dharma-Wardana, and F. Perrot, *Phys. Rev. Lett.* 84, 959 (2000).
- 20 M.W.C. Dharma-wardana, *Phys. Rev. B* 72, 125339 (2005).
- 21 M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot, *Europhys. Lett.* 63, 660 (2003).
- 22 M.W.C. Dharma-wardana, M.S. Murillo, *Phys. Rev. E* 77, 026401 (2008).
- 23 M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot, *Phys. Rev. B* 66, 14110 (2002).
- 24 M. W. C. Dharma-Wardana, *Int. J. Quantum Chem.* 112, 53 (2012).
- 25 Perrot F. and Dharma-Wardana M. W. C., *Phys. Rev. B.* 62, 16536 (2000).