

# ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЧАСТИЧНО ИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЫ

А.Е. Давлетов

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Предложена псевдопотенциальная модель взаимодействия частиц квазиклассической частично ионизованной плазмы, учитывающая как квантовомеханические эффекты, так и наличие нейтральной компоненты среды (атомов). Исследованы радиальные функции распределения и статические структурные факторы квазиклассической частично ионизованной плазмы водорода. Продемонстрирована возможность формирования ближнего порядка в системе плазма-нейтральный газ даже в условиях малости параметра связи, отвечающего за учет неидеальности во взаимодействии частиц.

## 1. Введение

Изучение особенностей взаимодействия и корреляционных явлений в частично ионизованной плазме представляет значительный интерес ввиду того, что она встречается как в естественных условиях, так и в различных практических приложениях. Знание потенциалов межчастичного взаимодействия позволяет рассчитывать кинетические коэффициенты [1,2], в то время как корреляционные функции полностью определяют термодинамические свойства плазменной среды [3,4].

В дальнейшем рассматривается частично ионизованная плазма водорода, состояние которой характеризуется безразмерным параметром связи  $\Gamma = e^2 / ak_B T$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $e$  – электрический заряд,  $a = (3/4\pi n)^{1/3}$  – среднее расстояние между частицами,  $n$  – полная концентрация протонов водорода, и безразмерным параметром плотности  $r_s = a/a_B$ , здесь  $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$  – первый Боровский радиус,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m_e$  – масса электрона.

## 2. Псевдопотенциальная модель

Квазиклассическая частично ионизованная плазма состоит как минимум из трех компонент: электронов и ионов, вместе образующих плазменную, заряженную компоненту и атомов, составляющих нейтральную компоненту вещества. В этом случае обобщенное уравнение Больцмана-Пуассона при переходе в Фурье-пространство дает систему уравнений, решение которой имеет вид [5]

$$\tilde{\Phi}_{ab}(k) = \frac{1}{\Delta} \left( \tilde{\varphi}_{ab}(k) + \sum_{c=e,i,n} A_c [\tilde{\varphi}_{cc}(k)\tilde{\varphi}_{ab}(k) - \tilde{\varphi}_{ac}(k)\tilde{\varphi}_{bc}(k)] + \right. \\ \left. + \delta_{ab} \sum_{c,d=e,i,n} A_c A_d \left[ \frac{\tilde{\varphi}_{ac}(k)\tilde{\varphi}_{ad}(k)\tilde{\varphi}_{cd}(k) + \tilde{\varphi}_{aa}(k)\tilde{\varphi}_{cc}(k)\tilde{\varphi}_{dd}(k) - \tilde{\varphi}_{aa}(k)\tilde{\varphi}_{cd}(k)^2 - \tilde{\varphi}_{cc}(k)\tilde{\varphi}_{ad}(k)^2 - \tilde{\varphi}_{dd}(k)\tilde{\varphi}_{ac}(k)^2}{2} \right] \right), \quad (1)$$

$$\Delta = 1 + \sum_{a=e,i,n} A_a \tilde{\varphi}_{aa}(k) + \sum_{a,b} A_a A_b [\tilde{\varphi}_{aa}(k)\tilde{\varphi}_{bb}(k) - \tilde{\varphi}_{ab}(k)^2] + A_a A_b A_c \times \\ \times \left[ \frac{\tilde{\varphi}_{ab}(k)\tilde{\varphi}_{bc}(k)\tilde{\varphi}_{ac}(k)}{3} + \frac{\tilde{\varphi}_{aa}(k)\tilde{\varphi}_{bb}(k)\tilde{\varphi}_{cc}(k) - \tilde{\varphi}_{aa}(k)\tilde{\varphi}_{bc}(k)^2 - \tilde{\varphi}_{bb}(k)\tilde{\varphi}_{ac}(k)^2 - \tilde{\varphi}_{cc}(k)\tilde{\varphi}_{ab}(k)^2}{6} \right], \quad (2)$$

где  $A_a = n_a / k_B T$ , а  $\delta_{ab}$  – символ Кронекера,  $\tilde{\varphi}_{ab}(k)$  – Фурье-образ микропотенциала взаимодействия,  $n_a$  – концентрация частиц сорта  $a$ , принимающая значения  $e, p, n$  для

электронов, протонов и атомов соответственно,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура.

В обычном конфигурационном пространстве макроскопические потенциалы восстанавливаются с помощью обратного преобразования Фурье

$$\Phi_{ab}(r) = \int \tilde{\Phi}_{ab}(k) \exp(-ikr) d\mathbf{k}. \quad (3)$$

В качестве объекта исследования выберем квазиклассическую частично ионизованную водородную плазму, микропотенциалы взаимодействия частиц которой имеют следующий вид:

для нейтральной компоненты [6]

$$\varphi_{pn}(r) = -\varphi_{en}(r) = e^2 \left( \frac{1}{r} + \frac{1}{a_B} \right) \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right), \quad \varphi_{nn}(r) = \frac{e^2}{r} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}r}{a_B}\right), \quad (4)$$

для заряженной компоненты [7,8]

$$\varphi_{ab}(r) = \frac{e_a e_b}{r} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{r}{\lambda_{ab}}\right) \right] + \delta_{ae} \delta_{be} k_B T \ln 2 \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2 \pi \ln 2}\right). \quad (5)$$

Здесь  $e$  - элементарный заряд,  $e_a$  - электрический заряд частиц сорта  $a$ ,  $\lambda_{ab} = \hbar / (2\pi m_{ab} k_B T)^{1/2}$  - тепловая длина волны де Бройля,  $\hbar$  - постоянная Планка,  $m_{ab} = m_a m_b / (m_a + m_b)$  - приведенная масса частиц сортов  $a$  и  $b$ . Для точного определения поведения макропотенциалов необходимо знать ионизационное равновесие, которое мы определяем согласно самосогласованной химической модели [5].

Фурье-образы микропотенциалов (4) и (5) вычисляются элементарно

$$\varphi_{pn}(k) = -\varphi_{en}(k) = 4\pi e^2 \frac{k^2 + 8/a_B^2}{(k^2 + 4/a_B^2)^2}, \quad \varphi_{nn}(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2 + 2/a_B^2}, \quad (6)$$

$$\varphi_{ab}(k) = \frac{4\pi e_a e_b}{k^2 (1 + k^2 \lambda_{ab}^2)} + \delta_{ae} \delta_{be} \pi^3 \ln^{5/2} 2 k_B T \lambda_{ee}^3 2^{-\pi k^2 \lambda_{ee}^2 / 4}. \quad (7)$$

На рисунках 1-2 приведены зависимости электрон-электронного и электрон-атомного макропотенциалов от безразмерного расстояния  $R = r/a$  и параметра связи  $\Gamma$  при фиксированном параметре плотности  $r_s = 10$ .

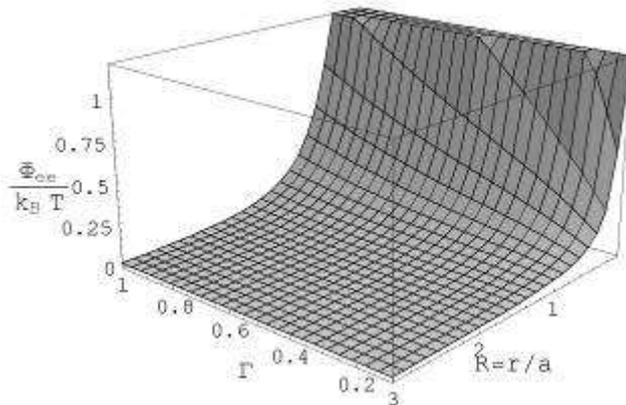


Рис. 1. Электрон-электронный псевдопотенциал при  $r_s = 10$ .

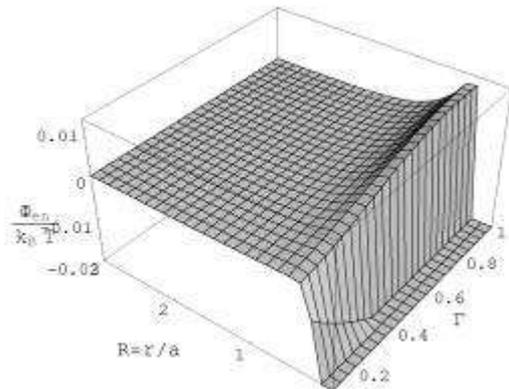


Рис. 2. Электрон-атомный псевдопотенциал при  $r_s = 10$ .

На рисунках 3-4 приведены зависимости электрон-электронного и электрон-атомного макропотенциалов от безразмерного расстояния  $R = r/a$  при фиксированных параметрах связи  $\Gamma = 1.0$  и плотности  $r_s = 10$ .

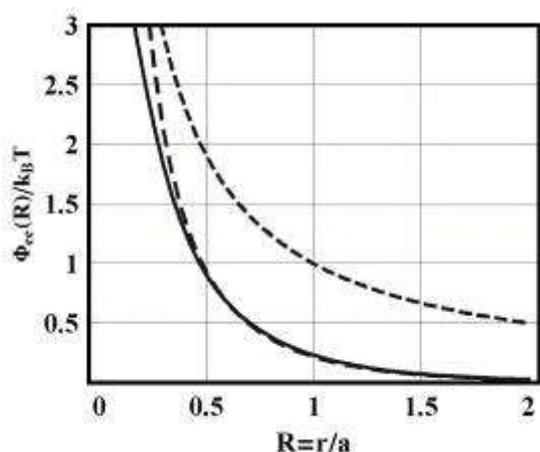


Рис.3. Электрон-электронный псевдопотенциал при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ . Сплошная линия: макропотенциал; мелкая штриховая линия: микропотенциал; штриховая линия: потенциал Дебая-Хюккеля.

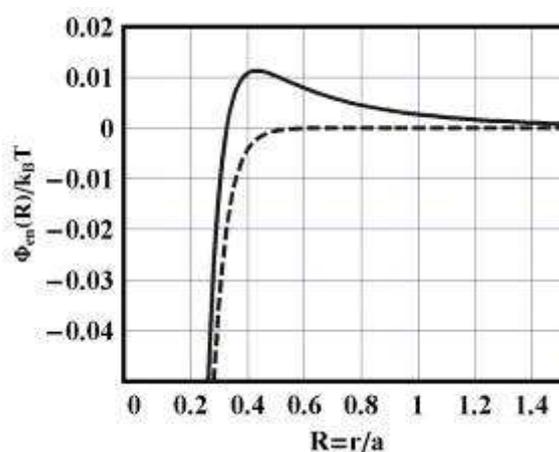


Рис. 4. Электрон-атомный псевдопотенциал при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ . Сплошная линия: макропотенциал; мелкая штриховая линия: микропотенциал.

Графический анализ рисунков позволяет сделать следующие выводы:

- Потенциал взаимодействия заряженных частиц ограничен на малых расстояниях, как и микропотенциал (5).
- Потенциал взаимодействия заряженных частиц является экранированным на больших расстояниях, как и потенциал Дебая-Хюккеля.
- При высоких степенях ионизации потенциал взаимодействия нейтральной компоненты практически не отличается от микропотенциала, что может рассматриваться как теоретическое обоснование некоторых вариантов химической модели плазмы, в которых вклады в свободную энергию от плазмы и газа рассматриваются независимо.
- При низких степенях ионизации во взаимодействиях нейтрал - заряженная частица появляются локальные экстремумы, то есть на определенных расстояниях между частицами происходит смена характера взаимодействия с притяжения на отталкивание или наоборот. Такое поведение имеет простое физическое толкование, связанное с коллективным характером взаимодействия. Например, рассмотрим взаимодействие электрон – атом. Согласно микропотенциалу (4) атом притягивает электрон, однако согласно ему же атом отталкивает протоны. Таким образом, вокруг атома образуется облако электронов, которое может вызвать появление эффективного отталкивания электронов.

### 3. Радиальные функции распределения

Известно, что радиальные функции распределения выражают плотность вероятности обнаружения двух частиц на определенном расстоянии друг от друга и в приближении парных корреляций имеют следующий вид [5]

$$g_{ab}(r) = 1 - \frac{\Phi_{ab}(r)}{k_B T}, \quad (8)$$

где  $\Phi_{ab}(r)$  - макропотенциал взаимодействия частиц сортов  $a$  и  $b$ , определенный выше.

Формула (8) позволяет вычислить радиальные функции распределения при любых параметрах плазмы, тем самым определив микроскопические свойства плазменной среды. На рисунках 5-6 приведены зависимости радиальных функций распределения от безразмерного расстояния  $R = r/a$  и параметра связи  $\Gamma$  при фиксированном параметре плотности  $r_s = 10$ .

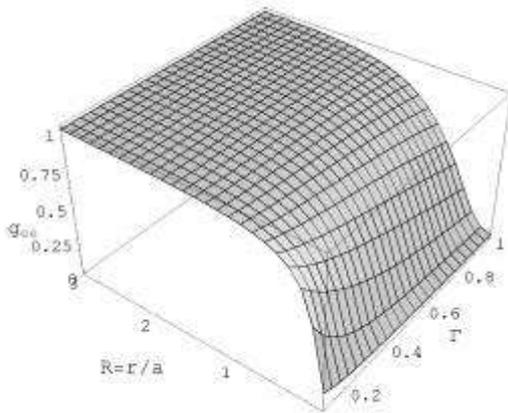


Рис. 5. Электрон-электронная радиальная функция распределения при  $r_s = 10$ .

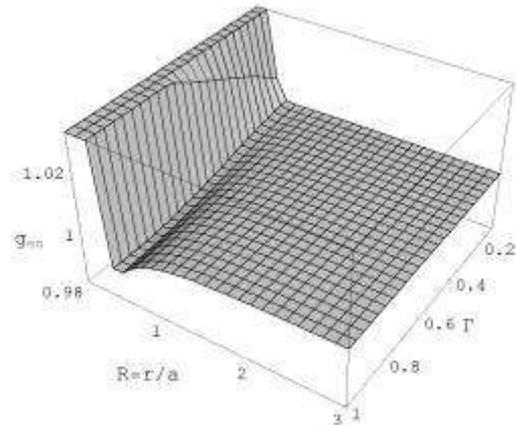


Рис. 6. Электрон-атомная радиальная функция распределения при  $r_s = 10$ .

На рисунках 7-8 приведены зависимости радиальных функций распределения от безразмерного расстояния  $R = r/a$  при фиксированных параметрах связи  $\Gamma = 0.1$  и плотности  $r_s = 10$ .

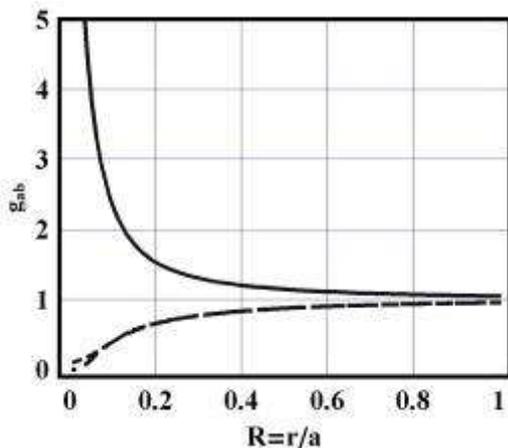


Рис. 7. Радиальные функции распределения заряженной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 0.1$ .

Сплошная линия: электрон-протонная; мелкая штриховая линия: электрон-электронная; штриховая линия: протон-протонная.

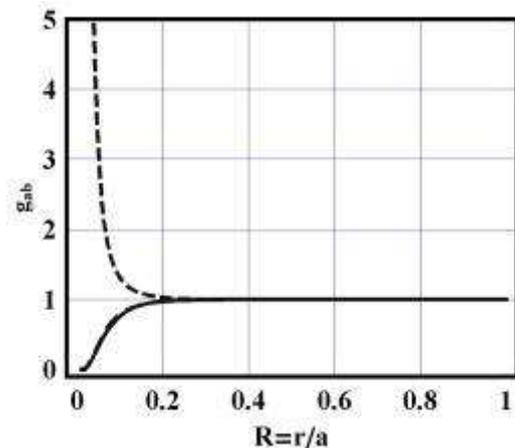


Рис. 8. Радиальные функции распределения нейтральной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 0.1$ .

Сплошная линия: протон-атомная; мелкая штриховая линия: электрон-атомная; штриховая линия: атом-атомная.

На рисунках 9-10 приведены зависимости радиальных функций распределения от безразмерного расстояния  $R = r/a$  при фиксированных параметрах связи  $\Gamma = 1.0$  и плотности  $r_s = 10$ .

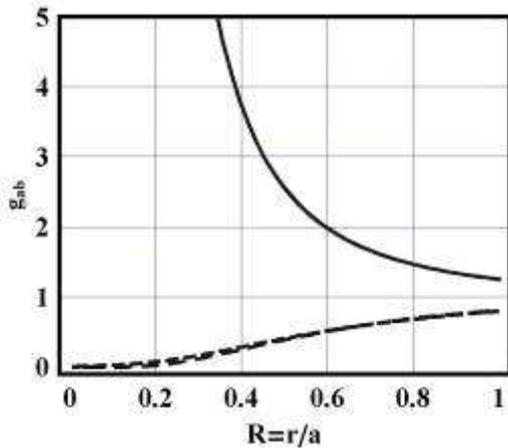


Рис. 9. Радиальные функции распределения заряженной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ .  
Сплошная линия: электрон-протонная; мелкая штриховая линия: электрон-электронная; штриховая линия: протон-протонная.

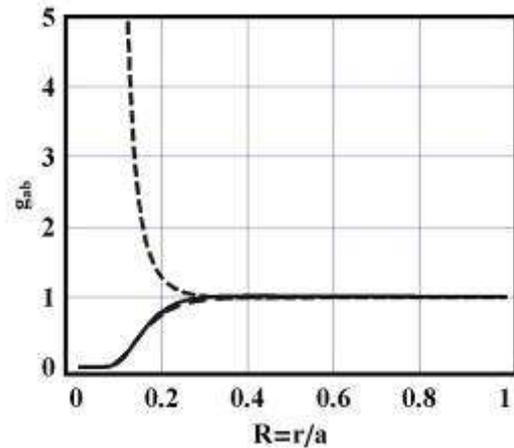


Рис. 10. Радиальные функции распределения нейтральной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ .  
Сплошная линия: протон-атомная; мелкая штриховая линия: электрон-атомная; штриховая линия: атом-атомная.

Графический анализ рисунков позволяет сделать следующие выводы:

- Радиальные функции распределения заряженных частиц ограничены на малых расстояниях, в отличие от классического варианта теории Дебая.
- Радиальные функции распределения заряженных частиц спадают медленнее чем функции распределения нейтральной компоненты, что является признаком более короткодействующего характера взаимодействия.
- При высоких степенях ионизации радиальные функции распределения имеют практически монотонный характер, а при низких степенях ионизации – нет.
- В соответствии с (8), при низких степенях ионизации на радиальных функциях распределения нейтрал - заряженная частица появляются локальные экстремумы. Так как физический смысл радиальных функций распределения – это вероятность обнаружения одной частицы на определенном расстоянии от другой частицы, то появление локальных экстремумов свидетельствует об образовании ближнего порядка в системе.

#### 4. Статические структурные факторы

Другой важной величиной, определяющей микроскопические свойства системы является структурный фактор  $S_{ab}(k)$ , который определяется через радиальные функции распределения следующим образом

$$S_{ab}(k) = \delta_{ab} + \int [g_{ab}(r) - 1] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) dr, \quad (9)$$

где  $\delta_{ab}$  - символ Кронекера.

С использованием формулы (8) данное соотношение переписывается так

$$S_{ab}(k) = \delta_{ab} - \frac{\sqrt{n_a n_b}}{k_B T} \tilde{\Phi}_{ab}(k). \quad (10)$$

Здесь  $n_a$  - концентрация частиц сорта  $a$ ,  $\tilde{\Phi}_{ab}(k)$  - Фурье-образ потенциала взаимодействия. Следует отметить, что в отличие от самого потенциала взаимодействия его Фурье-образ может быть записан в аналитическом виде.

На рисунках 11-12 приведены зависимости статических структурных факторов от безразмерного расстояния  $R=r/a$  и параметра связи  $\Gamma$  при фиксированном параметре плотности  $r_s=10$ .

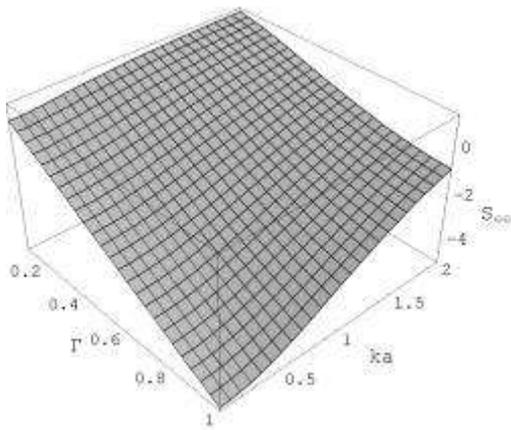


Рис. 11. Электрон-электронный структурный фактор при  $r_s=10$ .

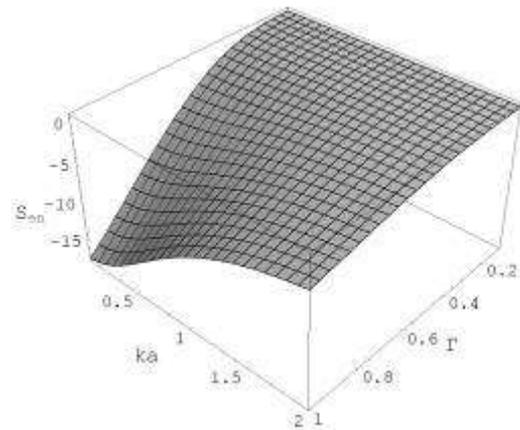


Рис. 12. Электрон-атомный структурный фактор при  $r_s=10$ .

На рисунках 13-14 приведены зависимости статических структурных факторов от безразмерного расстояния  $R=r/a$  при фиксированных параметрах связи  $\Gamma=0.1$  и плотности  $r_s=10$ .

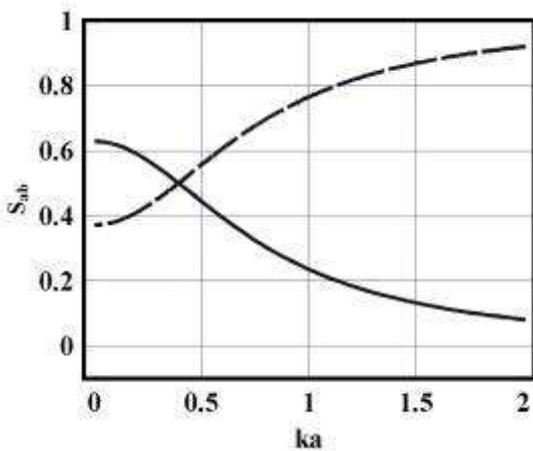


Рис. 13. Структурные факторы заряженной компоненты при  $r_s=10$  и  $\Gamma=0.1$ . Сплошная линия: электрон-протонный; мелкая штриховая линия: электрон-электронный; штриховая линия: протон-протонный.

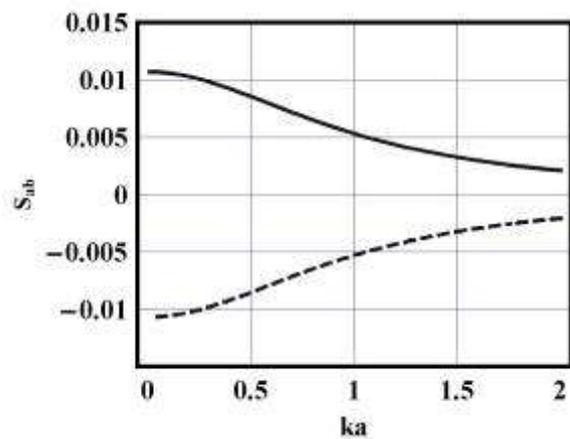


Рис. 14. Структурные факторы нейтральной компоненты при  $r_s=10$  и  $\Gamma=0.1$ . Сплошная линия: протон-атомный; мелкая штриховая линия: электрон-атомный; штриховая линия: атом-атомный.

На рисунках 15-16 приведены зависимости статических структурных факторов от безразмерного расстояния  $R=r/a$  при фиксированных параметрах связи  $\Gamma=1.0$  и плотности  $r_s=10$ .

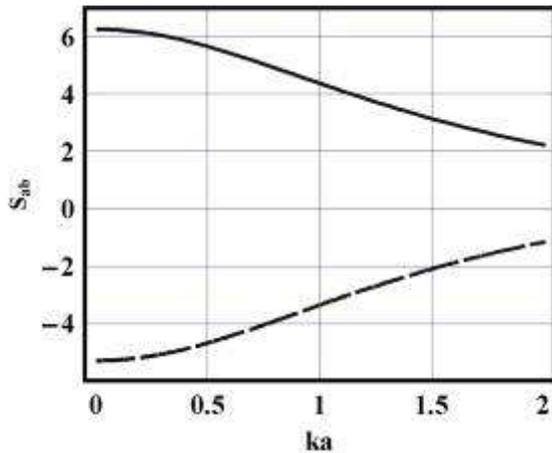


Рис. 15. Структурные факторы заряженной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ . Сплошная линия: электрон-протонный; мелкая штриховая линия: электрон-электронный; штриховая линия: протон-протонный.

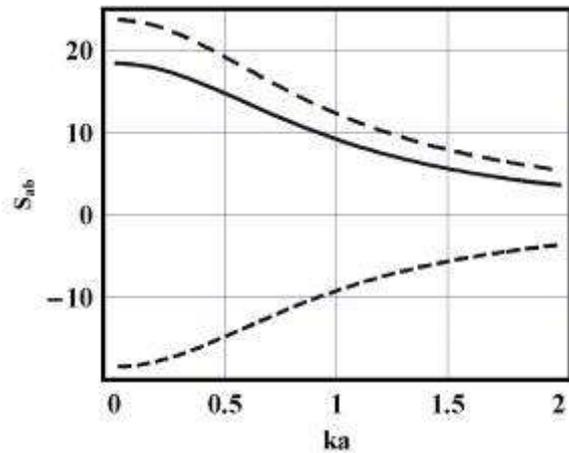


Рис. 16. Структурные факторы нейтральной компоненты при  $r_s = 10$  и  $\Gamma = 1.0$ . Сплошная линия: протон-атомный; мелкая штриховая линия: электрон-атомный; штриховая линия: атом-атомный.

Графический анализ рисунков позволяет сделать следующие выводы:

- В отличие от радиальных функций распределения структурные факторы системы всегда имеют монотонную зависимость от волнового числа.
- Структурные факторы электрон-электрон и протон-протон совпадают в широкой области изменения параметров плазмы.
- При высоких степенях ионизации совпадают структурные факторы электрон-атом и протон-атом, оставаясь малыми по абсолютной величине. При снижении степени ионизации начинают выявляться различия, свидетельствующие о том, что заряженная и нейтральная компонента больше не могут рассматриваться независимо.
- При высоких степенях ионизации структурные факторы заряженной компоненты по абсолютной величине значительно превышают структурные факторы нейтральной подсистемы, а при снижении степени ионизации они становятся сравнимыми.

## 5. Выводы

В данной работе была предложена псевдопотенциальная модели квазиклассической частично ионизованной плазмы и исследованы ее корреляционные функции. Обнаружена возможность формирования ближнего порядка в системе плазма-нейтральная компонента, связанная с немонотонным характером поведения радиальных функций распределения. Полученные результаты могут быть использованы для расчета как термодинамических, так и транспортных характеристик квазиклассической частично ионизованной плазмы.

## Литература

1. Arkhipov Yu. V., Baimbetov F. B., Davletov A. E., Starikov K.V., Journal of Plasma Physics, **v.68**, 81 (2002).
2. Архипов Ю.В., Баимбетов Ф.Б., Давлетов А.Е., Стариков К.В., «Псевдопотенциальная теория плотной высокотемпературной плазмы». (Алматы, «Казак Университеті», 2002).
3. Arkhipov Yu. V., Baimbetov F. B., Davletov A. E., Ramazanov T.S., Contributions to Plasma Physics, **v.39**, 495 (1999)
4. Arkhipov Yu. V., Baimbetov F. B., Davletov A. E., The European Physical Journal D, **v.8**, 299 (2000).

5. Arkhipov Yu. V., Baimbetov F. B., Davletov A. E., *Physics of Plasmas*, v.12, 082701 (2005).
6. Мотт Н.Ю., Мессе Г. «Теория атомных столкновений». (Москва, Мир, 1974).
7. Deutsch C. *Physics Letters A*, v.60, 317 (1977).
8. Minoo H., Gombert M.M., Deutsch C. *Physical Review A*, v.23, 924 (1981).

### **Квазикласикалық жартылай иондалған плазманың потенциалдық моделі және корреляциялық функциялары**

**А.Е. Давлетов**

Квант-механикалық әсерін және ортада нейтрал компоненттерін (атомдардың) барын ескеретін квазикласикалық жартылай иондалған плазма үшін бөлшектердің әрекеттесуін сипаттайтын псевдопотенциалдық модель ұсынылған. Сутегі квазикласикалық жартылай иондалған плазманың таралуының радиалды функциялары және статикалық құрылым факторлары зерттелінген. Бөлшектердің өзара әрекеттесуіндегі идеал еместігін ескеретіне жауап беретін байланыс параметрдің кіші болған жағдайда плазма-нейтрал газ системасында жақын реттің құрылу мүмкіндігі көрсетілген.

### **Pseudopotential model and correlation functions of semiclassical partially ionized plasmas**

A.E. Davletov

Pseudopotential model of particle interaction in semiclassical partially ionized plasmas, taking into account both quantum-mechanical effects and presence of the neutral component (atoms), is proposed. Radial distribution functions and static structure factors are investigated for the case of hydrogen plasmas. Possibility of the short-range order formation is shown for the plasma-neutral gas system even for small values of the coupling parameter related to the nonideality in particle interaction.