

УДК 53.072+533.9:51-73

М.Т. Габдуллин<sup>1\*</sup>, Т.Н. Исмагамбетова<sup>2</sup><sup>1</sup>Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа  
Каз-НУ им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы, Казахстан<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики  
КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

\*E-mail: gabdullin@physics.kz

**Термодинамические свойства  
квазиклассической полностью ионизованной водородной плазмы**

В данной работе рассматривается полностью ионизованная водородная плазма, состоящая из электронов и ионов, при концентрации  $n = n_e + n_i = 10^{20} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  и температуре  $T = 5 \cdot 10^4 \div 10^6 \text{ K}$ . При исследовании свойств такой плазмы были использованы квазиклассические потенциалы взаимодействия, которые учитывают квантово-механические эффекты дифракции и симметрии на малых расстояниях. Эффект экранирования был учтен с помощью численного решения интегрального уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении, которое связывает полную и прямую корреляционные функции с парным потенциалом взаимодействия частиц. При рассмотрении радиальных функций распределения было обнаружено, что эффект симметрии оказывает значительное влияние на взаимодействие частиц на малых расстояниях для больших плотностей. На основе квазиклассических потенциалов взаимодействия и радиальных функций распределения были рассчитаны термодинамические характеристики неидеальной водородной плазмы (внутренняя энергия и уравнение состояния). Ослабление взаимодействия между заряженными частицами вследствие квантового эффекта симметрии приводит к увеличению значения корреляционной энергии и давления плазмы.

**Ключевые слова:** квазиклассические потенциалы взаимодействия, радиальные функции распределения, термодинамические характеристики.

M.T. Gabdullin, T.N. Ismagambetova

**Thermodynamic properties of semiclassical fully ionized hydrogen plasma**

In this work a fully ionized hydrogen plasma consisting of electrons and ions is described. The number density varies in the range  $n = n_e + n_i = 10^{20} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  and the temperature domain considered here is  $T = 5 \cdot 10^4 \div 10^6 \text{ K}$ . The semiclassical interaction potentials, taking into account the quantum-mechanical diffraction and symmetry effects at short distances, were used for the investigation of such plasma's properties. The screening effect was taken into account by using numerical solution of the Ornstein-Zernike equation in HNC approximation. This equation relates the full and direct correlation functions with pair interaction potential of the particles. When considering radial distribution functions it was turn out that symmetry effect had a greater impact on particles' interaction for more dense plasma at small distances. On the

basis of semiclassical interaction potentials and radial distribution functions the thermodynamic properties of nonideal hydrogen plasma (internal energy and equation of state) were calculated. Due to the quantum-mechanical effect of symmetry interaction between charged particles weakens what leads to increase in the correlation energy and the pressure of plasma.

**Keywords:** semiclassical interaction potentials, radial distribution functions, thermodynamic characteristics.

М.Т.Габдуллин, Т.Н.Исмагамбетова

### Квазиклассикалық толық иондалған сутекті плазманың термодинамикалық қасиеттері

Осы жұмыста концентрациясы  $n = n_e + n_i = 10^{20} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  және температурасы  $T = 5 \cdot 10^4 \div 10^6 \text{ K}$  болатын, электрондар мен иондардан құрылған толық иондалған сутекті плазма қарастырылады. Осындай плазманың қасиеттерін зерттеуде кіші арақашықтықтарда квантты-механикалық дифракция және симметрия құбылыстарын ескеретін квазиклассикалық әсерлесу потенциалдары пайдаланылған. Гиперцептік жуықтаудағы Орнштейн-Церникенің интегралдық теңдеуін сандық шешу арқылы экрандалу құбылысы ескерілген. Осы теңдеу толық және тура корреляциялық функцияларды бөлшектер әсерлесуінің қос потенциалымен байланыстырады. Радиалды таралу функцияларын қарастыру барысында, симметрия құбылысы кіші арақашықтықтарда үлкен тығыздықтағы плазма бөлшектерінің әрекеттесуіне зор әсер ететіні анықталды. Квазиклассикалық әсерлесу потенциалдарының және радиалды таралу функцияларының негізінде идеалды емес сутекті плазманың термодинамикалық функциялары (ішкі энергия мен күй теңдеуі) есептелінді. Квантты-механикалық симметрия құбылысының салдарынан зарядталған бөлшектердің арасындағы әсерлесудің әлсіреуі, корреляциялық энергияның және плазманың қысымының артуына әкеліп соғады.

**Түйін сөздер:** квазиклассикалық әсерлесу потенциалдары, радиалды таралу функциялары, термодинамикалық сипаттамалары.

### Введение

Исследование неидеальной плазмы сейчас привлекает внимание ученых из разных стран. Прежде всего это связано с изучением астрономических объектов, встречающихся в природе, таких как недра планет-гигантов, белые карлики и т.д. С точки зрения практического применения неидеальная плазма является рабочим телом различных плазменных реакторов, в частности, при создании установок управляемого термоядерного синтеза с инерционным удержанием.

Существует множество методов исследования свойств неидеальной плазмы. Например, методы компьютерного моделирования, такие как Монте-Карло (МК) и молекулярная динамика (МД), теоретические подходы, такие как теория линейного диэлектрического отклика, метод функций Грина, метод интегральных уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона (ББГКИ) и Орнштейна-Цернике, экспериментальные методы, такие как ударно-волновое сжатие.

### Параметры плазмы

Состояние плазмы описывается безразмерными параметрами. Один из таких параметров – это параметр связи, отношение потенциальной энергии взаимодействия между частицами к их тепловой энергии:

$$\Gamma = \frac{(Ze)^2}{ak_B T},$$

где  $a = (3/4\pi n)^{1/3}$  – среднее расстояние между частицами.

$r_s = a/a_B$  – параметр плотности, где  $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$  – радиус Бора.

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

– параметр вырождения для электронной компоненты, где  $E_F$  – энергия Ферми электронов.

### Потенциалы взаимодействия

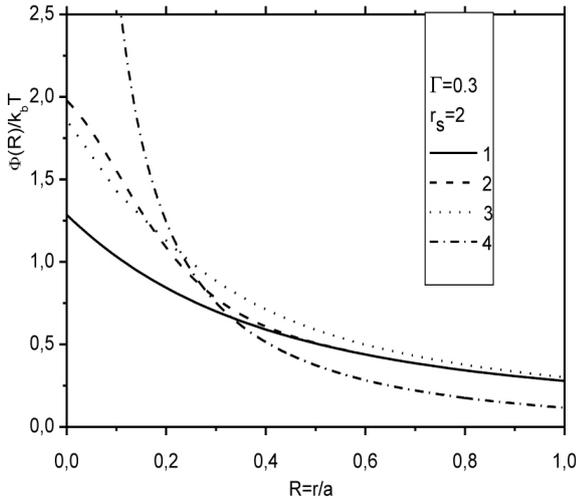
При расчетах структурных и термодинамических характеристик были использованы квазиклассические потенциалы взаимодействия

[1], учитывающие эффект экранировки на больших расстояниях и квантово-механические

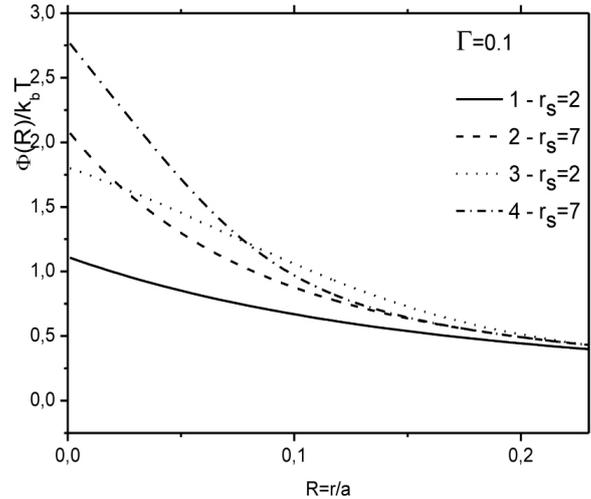
эффекты дифракции и эффект симметрии [2] – на малых:

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

где  $\lambda_{ab} = \hbar / \sqrt{2\pi m_{ab} k_B T}$  – тепловая длина волны Де-Бройля,  $b = 0.033$ .



**Рисунок 1** – электрон-электронные потенциалы взаимодействия частиц полностью ионизованной плотной квазиклассической плазмы: 1 – квазиклассический потенциал (1) без учета симметрии, 2 – квазиклассический потенциал (1) с учетом симметрии, 3 – потенциал Дойча, 4 – потенциал Дебая.



**Рисунок 2** – электрон-электронные потенциалы взаимодействия частиц полностью ионизованной плотной квазиклассической плазмы: 1, 2 – квазиклассический потенциал (1) без учета симметрии, 3, 4 – квазиклассический потенциал (1) с учетом симметрии.

На рисунке 1 представлены различные потенциалы взаимодействия для электрон-электронной пары при  $\Gamma=0.3$  и  $r_s=2$ . Из рисунка видно, что потенциал (1) на больших расстояниях стремится к результатам, полученным на основе потенциала Дебая-Хюккеля, учитывающего эффект экранировки, и на малых расстояниях он конечен, как и потенциал Дойча, учитывающий квантово-механические эффекты дифракции и симметрии.

На рисунке 2 показаны потенциалы взаимодействия с учетом и без учета эффекта симметрии при разных значениях параметра плотности. Из рисунков видно, что на малых расстояниях для больших плотностей из за эффекта симметрии значение потенциала увеличивается.

**Радиальные функции распределения**

Радиальные функции распределения  $g(r)$  были получены на основе численного решения интегрального уравнения Орнштейна-Цернике [3]:

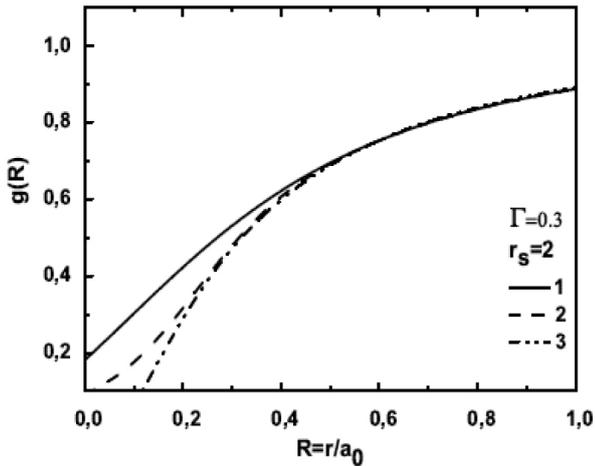
$$h(\vec{r}) = C(\vec{r}) + n \int C(\vec{r}_3 - \vec{r}_1) h(|\vec{r}_3 - \vec{r}_2|) dr_3, \quad (2)$$

в гиперцепном приближении:

$$C_{гипц}(r) = h(r) - \ln g(r) - \frac{\Phi(r)}{k_B T}, \quad (3)$$

$h(\vec{r}) = g(\vec{r}) - 1$  где – полная корреляционная функция,  $C(\vec{r})$  – прямая корреляционная функция.

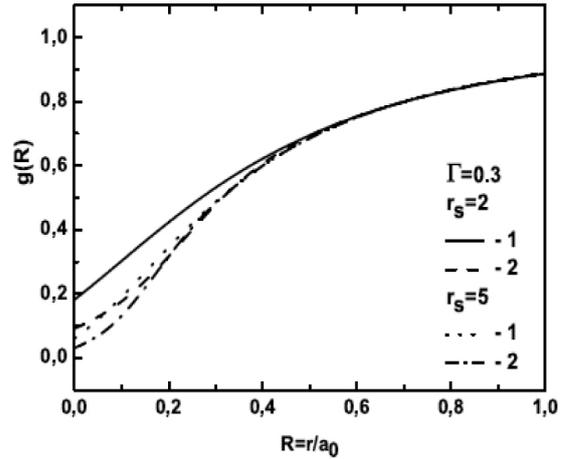
На рисунке 3 представлены радиальные функции распределения, полученные на основе различных потенциалов взаимодействия для электрон-электронной пары при  $\Gamma=0.3$  и  $r_s=2$ . Из рисунка видно, что на больших расстояниях кривая, полученная на основе квазиклассического потенциала (1), находится в хорошем согласии с результатами, полученными на основе потенциала Дебая, учитывающей



**Рисунок 3** – электрон-электронные радиальные функции распределения: 1 – квазиклассический потенциал (1) без учета симметрии, 2 – квазиклассический потенциал (1) с учетом симметрии, 3 – потенциал Дебая

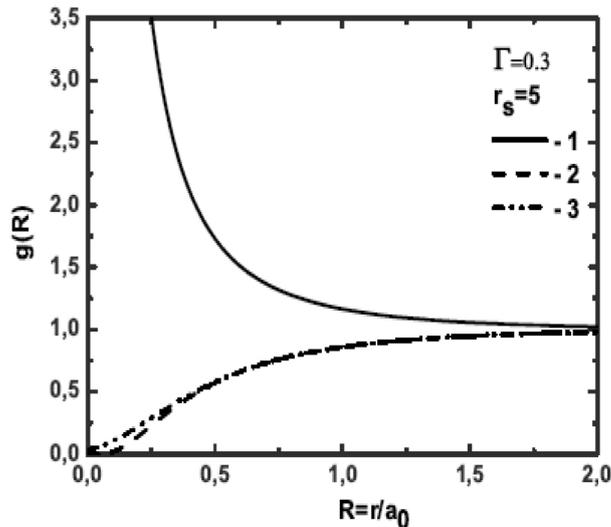
эффект экранирования.

На рисунке 4 показаны радиальные функции распределения, полученные на основе эффективных потенциалов с учетом и без учета эффекта симметрии при различных значениях параметра плотности. Из рисунка видно, что на малых расстояниях из-за эффекта симметрии вероятность обнаружения одного электрона на расстоянии  $R$  от другого уменьшается.



**Рисунок 4** – электрон-электронные радиальные функции распределения: 1 – квазиклассический потенциал (1) без учета симметрии, 2 – квазиклассический потенциал (1) с учетом симметрии

На рисунке 5 показаны радиальные функции распределения для различных типов взаимодействия частиц.



**Рисунок 5** – радиальные функции распределения, полученные на основе квазиклассического потенциала (1) с учетом эффекта симметрии: 1 – электрон-протонное взаимодействие, 2 – электрон-электронное взаимодействие, 3 – протон-протонное взаимодействие

**Термодинамические свойства**

Внутренняя энергия и давление были расчи-

таны на основе радиальных функций распределе-  
ния и потенциалов межчастичного взаимодействия:

$$E = E_{id} - \pi \sum_{\alpha=i,e} n_{\alpha} \sum_{\beta=i,e} n_{\beta} \int_0^{\infty} g^{\alpha\beta} r \Phi^{\alpha\beta} r r^2 dr, \quad (4)$$

$$P = P_{id} - \frac{2}{3} \pi \sum_{\alpha=i,e} n_{\alpha} \sum_{\beta=i,e} n_{\beta} \int_0^{\infty} \frac{\partial \Phi_{\alpha\beta}(r)}{\partial r} g_{\alpha\beta}(r) r^3 dr, \quad (5)$$

где  $\Phi(r)$  – потенциал взаимодействия частиц,  
 $g(r)$  – радиальная функция распределения,

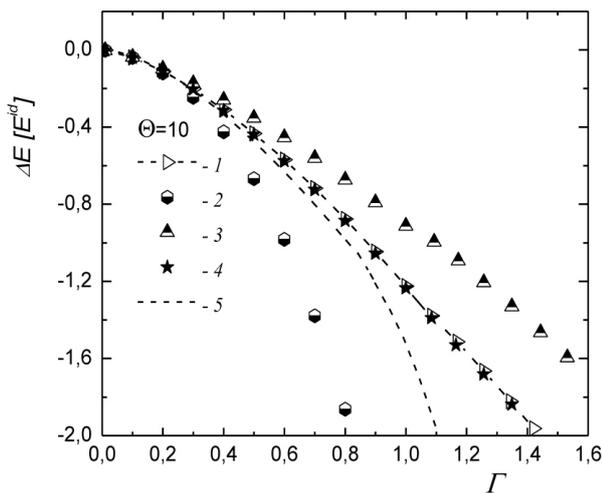
$E_{id} = \frac{3}{2} N k_B T$  –  
 $N$  – число частиц в системе, –  
внутренняя энергия идеального газа,  
 $P_{id} = n k_B T$  – давление идеального газа.

На рисунке 6 показаны корреляционные  
энергии плазмы при фиксированном значении  
параметра вырождения для различных  
потенциалов. Из рисунка видно, что при малых  
 $\Gamma$  результаты, полученные на основе различных  
приближений, хорошо согласуются между  
собой. Ослабление взаимодействия между  
заряженными частицами вследствие квантовых  
эффектов дифракции и симметрии приводит к  
увеличению значения корреляционной энергии.

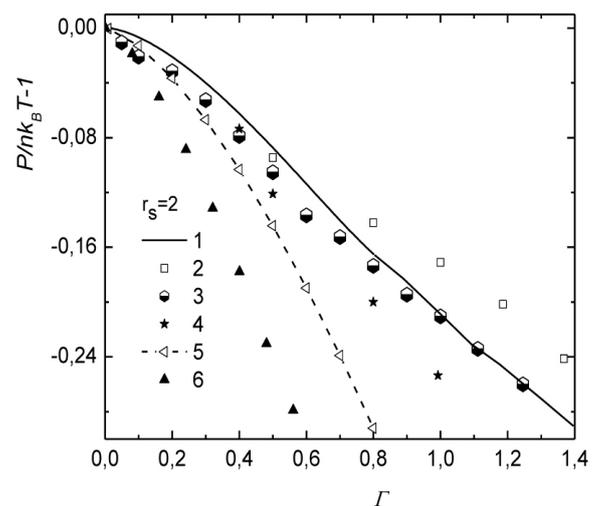
На рисунке 7 показана неидеальная  
составляющая давления плазмы при  
фиксированном значении параметра плотности  
для различных потенциалов. Как видно из  
рисунка, результаты, полученные на основе  
формулы (1), хорошо согласуются с результатами,  
полученными на основе теории Дебая-Хюккеля,  
при малых значениях параметра связи.

**Выводы**

Показано, что результаты, полученные на  
основе квазиклассического потенциала взаи-  
мдействия, хорошо согласуются с результатами,  
учитывающими квантовые эффекты дифракции  
(потенциал Дойча). Электрон-электронные  
радиальные функции распределения,



**Рисунок 6** – корреляционная энергия водородной  
плазмы: 1 – на основе ква-зиклассического  
потенциала (1), 2 – ре-зультаты Ишимару [4],  
3 – [5], 4 – [6], 5 – теория Дебая



**Рисунок 7** – неидеальная составляющая уравнения  
состояния водородной плазмы: 1 – на основе  
квазиклассического потенциала (1), 2 – [7],  
3 – результаты Ишимару [4], 4 – [8], 5 – теория  
Дебая, 6 – потенциал из ра-боты [9]

рассчитанные для полностью ионизованной плазмы при фиксированном параметре связи и различных параметрах плотности, показали, что на малых расстояниях из-за эффекта симметрии вероятность обнаружения одного электрона на расстоянии  $R$  от другого уменьшается. Анализ результатов вычисления термодинамических функций (уравнения состояния и внутренней

энергии) показал, что ослабление взаимодействия между заряженными частицами вследствие учета квантовых эффектов дифракции и симметрии приводит к увеличению корреляционной энергии и положительному вкладу в давление плазмы.

Данная работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта 1116/ГФ.

### References

- 1 Deutsch C., Combert M.M., J. Math. Phys. - 1976. - Vol. 17, № 7. - P. 1077-1090.
- 2 Moldabekov Zh.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Pair Interaction Potential of Particles for Two-Component Plasma // Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol.52, No 3. – P. 207 – 210.
- 3 Kittel Csh. Vvedenie v fiziku tverdogo tela. – M.: Fismatgiz, 1963. – 696 s.
- 4 Tanaka S., Yan X., Ichimaru S. Equation of state and conductivities of dense hydrogen plasmas near the metal-insulator // Phys. Rev. A. – 1990. – Vol. 41. – P. 5616.
- 5 Tanaka S., Ichimaru S. Parametrized equation of state for dense hydrogenic plasmas // Phys. Rev. A. – 1985. – Vol. 32. – P. 3756.
- 6 Ebeling W., Norman G.E. // Contrib. Plasma Phys. – 1999. – Vol. 39. - P.61.
- 7 Hansen J.P., McDonald I.R. // Phys. Rev. A. – 1981. – Vol. 23. - P. 2041.
- 8 Ramazanov T.S, Baimbetov F.B., Bekenov M.A., Redmer R., Röpke G. // In: Strongly Coupled Coulomb Systems / ed. G. Kalman, M. Romel, K. Blagoev. – NY.: Plenum Press. – 1998. – P.236.
- 9 Ramazanov T. S., Dzhumagulova K. N., Gabdullin M.T. // J. Phys. A: Math. Gen. - 2006. - Vol. 39. - P. 249-253.