УДК 533.9

[1]Ю.В. Архипов*, [1]А. Аскарулы, [1]А.Б. Ашикбаева, [2]И.М. Ткаченко

[1]НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Республика Казахстан, г. Алматы
[2]Валенсийский Политехнический университет, Испания, г. Валенсия
*E-mail: yuriy.arkhipov@kaznu.kz

Анализ моделей диэлектрических функций, используемых в плотной плазме

Исследовано выполнение правил сумм для функции потерь, определяемой с использованием различных моделей диэлектрических функций (ДФ): приближение хаотических фаз (ПХФ), Мермина, а также расширенные модели ПХФ и Мермина. В расширенных моделях применялись динамические частоты столкновения, рассчитанные по данным компьютерных симуляций и в рамках модели Борна-Мермина. Показано, что при использовании ДФ, полученных методом моментов, все правила сумм выполняются. Для остальных моделей ДФ эти равенства выполняются частично. Модели Мермина и ПХФ не удовлетворяют известным, связанным со сходящимися частотными нулевым и четвертым моментами, правилам сумм, но удовлетворяют второму правилу сумм. Эти модели учитывают электрон-электронные взаимодействия лишь при введении электронной поправки на локальное поле, но не учитывают электрон-ионные взаимодействия.

Ключевые слова: метод моментов, диэлектрическая функция, функция потерь, динамическая функция локальных полей.

Yu. V. Arkhipov, A. Askaruly, A.B. Ashikbayeva, I.M. Tkachenko

Analysis of models of dielectric functions used in a dense plasma

The fulfilment of sum rules for the loss function which is determined using different models of the dielectric function (DF): the random phase approximation (RPA), Mermin, and extended models of RPA and Merminis investigated. In the extended models the dynamic collision frequency is used, which is calculated according to computer simulations and within the Born-Mermin model. It is shown that the DF obtained by the method of moments satisfyall sum rules. For other models of DF these equalities hold in part. Mermin and RPA models do not satisfy known, associated with convergent frequency zero and fourth moment, sum rules, but satisfy the second sum rule. These models take into account the electron-electron interaction only with the introduction of electron correction on a local-field, but do not take into account the electron-ion interaction.

Key words: method of moments, dielectric function, loss function, the dynamic local fields function.

Ю.В. Архипов, Ә. Асқарұлы, А.Б. Ашикбаева, И.М. Ткаченко

Тығыз плазмада қолданатын диэлектрлік функцияларының моделдерін талдау

Хаосты фазалар жуықтау (ХФЖ), Мермин, сонымен бірге жаңартылған ХФЖ және Мермин диэлектрлік функциясының түрлі моделдерін қолданып анықталған жоғалу функциясы үшін қосындылар ережелерінің орындалуы зерттелінген. Жаңартылған моделдерде компьютер симуляцияларының деректері бойынша және Борн-Мермин моделі шеңберінде есептелінген динамикалық қақтығысу жиілігі кіреді. Көрсетілгендей, моменттер әдісімен алынған барлық қосындылар ережелері орындалады. Қалған диэлектрлік функция моделдері үшін бұл теңдіктер жартылай орындалады. Мермин және ХФЖ моделдері танымал нөл және төртінші моменттерге сәйкес қосындылар ережелеріне қанағаттанбайды, бірақ екінші қосындылар ережесіне қанағаттанады. Бұл моделдер тек локалдық өріске электрондық түзетуді енгізгенде ғана электрон-электрондық өзара әрекеттесуді ескереді, бірақ электрон-иондық өзара әрекеттесулерді ескермейді.

Түйін сөздер: моменттер әдісі, диэлектрлік функция, жоғалу функциясы, локальдық өрістерінің динамикалық функциясы.

Введение

В настоящей заметке исследуется выполнение правил сумм для функции потерь $L(k,\omega) = -\dfrac{\operatorname{Im}\varepsilon^{-1}(k,\omega)}{\omega}$, в которой используются различные модели диэлектрических функций – $\varepsilon(k,\omega)$, такие, как приближение хаотических фаз (ПХФ), Мермина, а также расширенные модели ПХФ и Мермина. Все обозначения работы соответствуют [1]. В частности, определяется, удовлетворяют ли названные модели точным правилам сумм, являющимся частотными моментами функции потерь, следующим образом:

$$C_\nu(k) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega^\nu L(k,\omega)d\omega,$$
$$\nu = 0,2,4. \qquad (1)$$

При этом также проведено сравнение с ДФ, полученной методом моментов (ММ).

В приближении хаотических фаз диэлектрическая функция ПХФ определяется как

$$\varepsilon_{RPA}(k,\omega) = \varepsilon_r(k,\omega) + i\varepsilon_i(k,\omega), \qquad (2)$$

причем мнимая часть записывается в виде

$$\varepsilon_i(k,\omega) = \frac{1}{8z^3k_F}\theta\ln\left[\frac{1+\exp\left(D\left[1-(u-z)^2\right]\right)}{1+\exp\left(D\left[1-(u+z)^2\right]\right)}\right]. \qquad (3)$$

Здесь введены следующие обозначения: $u = \omega/k\upsilon_F$ и $z = \dfrac{k}{2k_F}$, под υ_F, k_F подразумевается скорость и волновое число Ферми, соответственно: $\upsilon_F = \hbar k_F$, $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, $\hbar$ – постоянная Планка, $D = \theta^{-1}$.

Бесстолкновительная однокомпонентная (обычно, электронная) диэлектрическая проницаемость Линдхарда [2] была обобщена Мермином [3], а затем Дасом [4], который использовал альтернативный метод вариации функции распределения, чтобы учесть столкновения заряженных частиц:

$$\varepsilon_M(k,\omega) = 1 +$$
$$+\frac{(\omega+i\nu)\left[\varepsilon_{RPA}(k,\omega+i\nu)-1\right]}{\omega+i\nu\left[\varepsilon_{RPA}(k,\omega+i\nu)-1\right]/\left[\varepsilon_{RPA}(k,0)-1\right]}, \qquad (4)$$

где $\nu = \dfrac{2}{3}\sqrt{\dfrac{2\pi}{m}}\dfrac{e^4 n}{(k_BT)^{3/2}}\Lambda$ – статическая частота столкновений. Для ее расчета необходимо знание обобщенного кулоновского логарифма Λ, который может быть определен через статические структурные факторы $S_{ab}(k)$ (a, b – сорта частиц).

Если в (4) вместо статической частоты столкновений ν использовать так называемую динамическую частоту соударений (ДЧС) $\nu(\omega)$, то область применимости этого выражения расширяется и его можно использовать в плотной неидеальной плазме, как это используется для ДФ в модели Друде-Лоренца [1].

В неидеальной плазме, для учета взаимодействий между электронами системы в ДФ моделях Мермина и ПХФ введем поправку на локальное поле, как указано в работе [5]:

$$G(k,\omega) = \frac{\nu G(k) + i\omega U(k)}{\nu - i\omega}, \qquad (5)$$

где статическая поправка на локальное поле $G(k)$ рассчитывается по методу, предложенному в [6, 7]. Такие модели в дальнейшем будут называться расширенными приближениями ПХФ и Мермина.

Метод моментов

Как уже было отмечено выше, наша задача заключается в сравнении вышеуказанных моделей с модельной ОДФ, полученной на основе метода моментов для чисто кулоновской системы:

$$\varepsilon^{-1}(k,z) = 1 + \frac{\omega_p^2(Q(k,z)+z)}{z(z^2-\omega_2^2(k)) + Q(k,z)(z^2-\omega_1^2)}. \qquad (6)$$

Здесь $Q(k,z)$ – функция класса Неванлинны [8-10]:

$$Q(k,\omega) = \frac{A\sqrt{\omega_p^5\omega}(1+i)}{\omega_2^2(k)-\omega_1^2(k)} + i\frac{\omega_2^2(k)-\omega_1^2(k)}{\nu}, \qquad (7)$$

где $A = \dfrac{\sqrt{2}}{3^{5/4}}r_s^{3/4}$.

Аналитические выражения для моментов определяются через статические парциальные структурные факторы [11]. Для чисто кулоновского взаимодействия выражения для моментов записываются в следующем виде:

$$C_0(k) = 1 - \varepsilon^{-1}(k,0) = 1 - \varepsilon^{-1}(k), \quad (8)$$

$$C_2(k) = \omega_p^2, \quad (9)$$

$$C_4(k) = \omega_p^4(1 + K(k) + U(k) + H). \quad (10)$$

Последние два вклада в четвертый момент (10) появляются из члена, отвечающего за взаимодействие в гамильтониане системы, и поэтому зависят от используемого потенциала,

$$U(k) = \frac{1}{2\pi^2 n}\int_0^\infty p^2 (S_{ee}(p) - 1) f(p,k) dp, \quad (11)$$

$$H = \frac{k_{ei}^2}{6\pi^2 n}\int_0^\infty \frac{p^2 S_{ei}(p)}{p^2 + k_{ei}^2} dp. \quad (12)$$

Важно также, что корреляционная поправка $U(k)$ в электронной жидкости зависит от статического структурного фактора $S_{ee}(k)$, в то время как в ДКП ион-ионный ССФ, $S_{ii}(k)$ будет появляться в выражении для четвертого момента только в первом порядке по отношению m_e / m_i, где m_i – масса иона [12-13].

Результаты исследований

Для исследования вышеизложенных моделей диэлектрической функции был проведен сравнительный анализ численных значений моментов $C_\nu(k)$ функции потерь $L(k,\omega)$ в точке k_F. При этом были получены следующие результаты для безразмерных значений отношения моментов к плазменной частоте с соответствующей степенью.

1. Рассмотрим сначала однокомпонентную плазму, где статические характеристики рассчитывались с помощью потенциала Кулона, а взаимодействия между электронами и ионами не учитывались, т.е. $H = 0$.

В таблицах 1-2 в качестве частоты соударений в модели Мермина использовалась динамическая частота соударений, найденная в [14].

Таблица 1 – Моменты функции потерь для $\Gamma = 1$, $r_s = 3.154$, $\theta = 1.71$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.40263	0.44587	0.40264	0.44602	0.51334
C_2	1.0002	1.0002	1	1	1
C_4	6.19394	6.04726	5.25867	5.11239	5.11239
ω_1^2	2.48422	2.24327	2.4836	2.24207	1.94802
ω_2^2	6.1925	6.04606	5.25866	5.11239	5.11239
					K=4.25866 U=-0.14628

Таблица 2 – Моменты функции потерь для $\Gamma = 1$, $r_s = 3.94$, $\theta = 2.14$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.41269	0.45859	0.41282	0.45880	0.51334
C_2	1.00007	1.00007	1	1	1
C_4	6.39448	6.24799	5.1255	4.97922	4.97922
ω_1^2	2.42328	2.18074	2.42238	2.17958	1.94802
ω_2^2	6.39405	6.24755	5.1255	4.97922	4.97922
					K=4.1255 U=-0.14628

В таблицах 3-4 в качестве частоты соударений в модели Мермина использовалась динамическая частота соударений, посчитанная по формуле [15] (модель Борна-Мермина [16]):

$$\nu(\omega)=\frac{n_i}{6\pi^2 m_e^2}\int_0^\infty q^6 V_{ei}^2(q) S_{ii}(q)\frac{\varepsilon_{RPA,e}(q,\omega)-\varepsilon_{RPA,e}(q,0)}{i\omega\omega_p^2}dq. \quad (13)$$

Здесь

$$V_{ei}(q)=-\frac{4\pi Ze^2}{q^2\varepsilon_{RPA,e}(q,0)} \quad (14)$$

– статический экранированный электрон-ионный потенциал взаимодействия. Заметим, что (13) была получена в кинетическом подходе и не содержит электрон-ионного корреляционного вклада.

Таблица 3 – Моменты функции потерь для $\Gamma=1.1$, $r_s=2.53$, $\theta=1.27$, $\nu_1=0.76$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.40282	0.44651	0.40302	0.44678	0.55319
C_2	1.00001	1.00001	1	1	1
C_4	5.81353	5.66716	5.17902	5.03274	5.03274
ω_1^2	2.4825	2.23959	2.48126	2.23822	1.80771
ω_2^2	5.81348	5.66711	5.17902	5.03274	5.03274
					K= 4.17902 U=-0.14628

Таблица 4 – Моменты функции потерь для $\Gamma=3.6$, $r_s=2.53$, $\theta=0.382$, $\nu_1=0.73$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.55862	0.66151	0.55886	0.66186	1.04272
C_2	1.00001	1.00001	1	1	1
C_4	3.72814	3.52482	3.01991	2.81667	2.81667
ω_1^2	1.79014	1.5117	1.78937	1.51089	0.95903
ω_2^2	3.72812	3.52479	3.01991	2.81667	2.81667
					K=2.01991 U=-0.20324

Рассмотрим двухкомпонентную кулоновскую систему, где статические характеристики при использовании ДЧС из численного эксперимента рассчитывались с модифицированным потенциалом Кельбга [14], а при применении ДЧС, рассчитанной в приближении Борна (13), – с потенциалом Дойча [17].

В таблицах 5-6 в качестве частоты соударений в модели Мермина использовалась динамическая частота соударений, найденная в [14].

Таблица 5 – Моменты функции потерь для $\Gamma=1$, $r_s=3.15$, $\theta=1.71$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.59833	0.61809	0.59817	0.618275	0.62892
C_2	1.00078	1.00077	1.00054	1.00054	1
C_4	6.19497	6.1165	5.25976	5.18146	9.51776
ω_1^2	1.67263	1.61915	1.67268	1.61828	1.59002
ω_2^2	6.19016	6.11176	5.2569	5.17865	9.51776
					K=4.25866 U=-0.07829 H=4.33743

Таблица 6 – Моменты функции потерь для $\Gamma = 1$, $r_s = 3.94$, $\theta = 2.14$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.60235	0.62379	0.602797	0.62439	0.62169
C_2	1.00061	1.00061	1.00054	1.00054	1
C_4	6.39574	6.32092	5.12659	5.05185	11.9288
ω_1^2	1.66119	1.60409	1.65984	1.60244	1.60852
ω_2^2	6.39183	6.31704	5.1238	5.0491	11.9288
					K=4.1255 U=-0.07474 H=6.87822

В таблицах 7-8 в качестве частоты соударений в модели Мермина использовалась динамическая частота соударений, посчитанная по формуле (13).

Таблица 7 – Моменты функции потерь для $\Gamma = 1.1$, $r_s = 2.53$, $\theta = 1.27$, $\nu_1 = 0.76$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.60813	0.62746	0.60829	0.62762	0.71598
C_2	1.00055	1.00055	1.00054	1.00054	1
C_4	5.81463	5.75308	5.18011	5.1187	8.42272
ω_1^2	1.64531	1.59462	1.64485	1.59419	1.39669
ω_2^2	5.81142	5.7499	5.17729	5.11591	8.42272
					K=4.17902 U=-0.06139 H=3.30511

Таблица 8 – Моменты функции потерь для $\Gamma = 3.6$, $r_s = 2.53$, $\theta = 0.382$, $\nu_1 = 0.73$

	ДФ Мермина (4)	Расширенная ДФ Мермина	ДФ ПХФ (2)	Расширенное ДФ ПХФ	ДФ метода моментов (6)
C_0	0.81827	0.83116	0.80744	0.83005	1.43903
C_2	1.00056	1.00056	1.00054	1.00054	1
C_4	3.72924	3.71079	3.021	2.99308	8.25483
ω_1^2	1.22278	1.20381	1.23916	1.2054	1.20494
ω_2^2	3.72714	3.70872	3.01936	2.99145	8.25483
					K=2.0199 U=-0.02787 H=5.26279

Заключение

Из результатов расчетов видно, что метод моментов как в ОКП, так и в ДКП полностью удовлетворяет всем правилам сумм. Также ясно, что в ОКП и ДКП условие второго момента, так называемое правило *f*-сумм, как в модели Мермина, так и в приближении хаотических фаз выполняется. При этом правило сумм $C_0(k)$ и правило сумм $C_4(k)$ для обеих моделей в ДКП не выполняются. Вводя же поправку на локальное поле как в ПХФ, так и в модели Мермина, мы вводим корреляции в системе между электронами; это означает, что четвертый момент должен состоять из трех слагаемых: $C_4(k) = 1 + K(k) + U(k)$, что и получается для расширенного ПХФ в ОКП и ДКП, но не для модели Мермина. Надо заметить, что в двухкомпонентной системе как модель Мермина, так и модель ПХФ не учитывают корреляции между электронами и ионами системы, т.е. в четвертом моменте нет слагаемого H.

Из всего выше сказанного можно сделать

следующий вывод: модели Мермина и ПХФ не удовлетворяют известным, связанным со сходящимися частотными моментами $C_0(k)$, $C_4(k)$ правилам сумм, но удовлетворяют второму правилу f-сумм C_2. Эти модели учитывают электрон-электронные взаимодействия лишь при введении электронной поправки на локальное поле, но не учитывают электрон-ионные взаимодействия; модель Мермина ухудшает модель ПХФ, а не улучшает ее, как надеялись авторы работ [18-19].

Отметим ещё, что если рассчитывать статическое значение ДФ в рамках каждой модели, то из-за соотношений Крамерса-Кронига значение нулевого момента согласуется с каждым соответствующим модельным выражением для статической ОДФ. С другой стороны, следует отметить, что если статическая ОДФ оценивается через ССФ «заряд-заряд», рассчитанный в приближении хаотических фаз, то ОДФ в приближении моментов удовлетворяет такому нулевому правилу сумм по построению, в отличие от других рассмотренных моделей.

References

1 ArkhipovYu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E. and Tkachenko I.M. Dielectric function of coupled plasmas, the stopping power, and the sum rules // Physical Review. E. – 2014. – Vol. 90. – P. 053102.

2 Lindhard J. On the properties of a gas of charged particles // Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk. – 1954. - Vol. 28. - P. 8.

3 Mermin N.D. Lindhard Dielectric Function in the Relaxation-Time Approximation // Phys. Rev. B. – 1970. - Vol. 2. – P. 2362.

4 Das A.K. The relaxation-time approximation in the RPA dielectric formulation // J. Phys. F. – 1975. – Vol. 5. – P. 2035.

5 Tkachenko I.M., ArkhipovYu.V., Askaruly A. The method of moments and its applications in plasma physics. – Germany: Lap Lambert Academic Publishing 2012. – p. 125.

6 TkachenkoI.M., AlcoberJ. and Fernandez de Cordoba P. Electronic correlations in real and model plasmas // J.Phys. IV France. – 2000. – Vol. 10. - P. 199-202.

7 Tanaka S., Ichimaru S. Dynamic theory of correlations in strongly coupled, classical one-component plasmas: Glass transition in the generalized viscoelastic formalism // Phys. Rev. A. – 1987. – Vol. 35. – P. 4743-4754.

8 ArkhipovYu.V., Ashikbayeva A.B., Davletov A.E., Tkachenko I.M. The extended Mermin approximation for the collisional plasma dielectric function // Abstracts of 14th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas - Rostock, Germany. – 2012. – P.43.

9 ArkhipovYu. V., AshikbayevaA.B., AskarulyA., DavletovA. E., DubovtsevD., TkachenkoI.M. Enhancement of stopping power in dense two-component plasmas // Abstracts of International Conference on the Strongly Coupled Coulomb Systems.- Santa Fe, New Mexico, USA. – 2014. – P.94.

10 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Analiz dielektricheskikh funktsy plotnoy plazmy // Mezhdunarodnoye rabocheye soveshchaniye «Fizika i tekhnologiya: Sovremennoye sostoyaniye i perspektivy», posvyashchennoye 80-letiyu professora Murzagaliyeva G.Zh. – Almaty. - 2013g. – S. 26-30.

11 Arkhipov Yu. V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A.E., Meirkanova G. M., Tkachenko I. M. Collective and static properties of model two-component plasmas // Phys. Rev. E. – 2007. – Vol. 76. – P. 026403-1–9.

12 Adamyan V. M., Tkachenko I.M. Sum rules and exact relations for quantal Coulomb systems // Contrib. Plasma Phys. – 2003. – Vol. 43. – P. 252-257.

13 Arkhipov Yu. V., Askaruly A., Ballester D., Davletov A.E., Tkachenko I.M., Zwicknagel G. Dynamic properties of one-component strongly coupled plasmas: The sum-rule approach // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81. – P. 026402-1–9.

14 Morozov I., Reinholz H., Röpke G., Wierling A. and Zwicknagel G. Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas // Phys. Rev E. – 2005. – Vol.71. – P. 066408 - 066420.

15 ThieleR., SperlingP., ChenM., BornathTh., FäustlinR. R., FortmannC., GlenzerS. H., KraeftW.-D., PukhovA., ToleikisS., TschentscherTh. and RedmerR. Thomson scattering on inhomogeneous targets // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 82. - P. 056404.

16 Fortmann C., Wierling A. and Röpke G. Influence of local-field corrections on Thomson scattering in collision-dominated two-component plasmas // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81. - P. 026405.

17 Hansen J.-P. Plasmon dispersion of the strongly coupled one component plasma in two and three dimensions // J. Phys. Lett. – 1981. – Vol. 42. – P. 397-400.

18 Barriga-Carrasco M.D. Dynamical local field corrections on energy loss in plasmas of all degeneracies // Phys. Rev. E. – 2009. - Vol. 79. – P. 027401.

19 Barriga-Carrasco M.D. Proton stopping using a full conserving dielectric function in plasmas at any degeneracy Phys. Rev. E. – 2010. - Vol. 82. – P. 046403.