

**Архипов Ю.В.<sup>1</sup>, Аскарулы А.<sup>1</sup>, Ашикбаева А.Б.<sup>1</sup>, Давлетов А.Е.<sup>1</sup>,  
Дубовцев Д.Ю.<sup>1</sup>, Сантыбаев Х.<sup>1</sup>, Ткаченко И.М.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
НИИ Экспериментальной и теоретической физики, Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Институт чистой и прикладной математики  
Валенсийского политехнического университета, Испания, г. Валенсия,  
\*e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

## **АНАЛИЗ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛОТНЫХ КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ**

В данной работе был проведен анализ различных методов (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевика и аналитических моделей), расчета статических характеристик. Были получены структурные характеристики однокомпонентной плазмы в широком диапазоне параметра связи различными современными методами (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевика и аналитических моделей). Все эти методы были проанализированы на выполнение фундаментального математического неравенства Коши-Шварца. В результате: методы HNC с эмпирической формулой функции мостиковой поправки и один из методов получения структурного фактора на основе фитинговой формулы не удовлетворяют неравенству Коши-Шварца. Другие вышеперечисленные методы расчета структурных характеристик удовлетворяют условиям вышесказанного неравенства. Для проведения анализа была получена функциональная зависимость, выражающая неравенство Коши-Шварца. Данная зависимость включает в себя частотные моменты, которые определяются в рамках метода моментов. Для удовлетворения неравенству, эта зависимость должна быть строго положительна. Для каждого рассмотренного метода получения статических структурных характеристик, была построена и проанализирована эта зависимость. В результате чего, было установлено что ряд методов не удовлетворяет неравенству Коши-Шварца.

**Ключевые слова:** однокомпонентная плазма, кулоновская система, метод гиперцепного приближения, интегральное уравнение Орнштейна-Цернике, неравенство Коши-Шварца.

Arkhipov Yu.V.<sup>1</sup>, Askaruly A.<sup>1</sup>, Ashikbayeva A.B.<sup>1</sup>, Davletov A.E.<sup>1</sup>,  
Dubovtsev D.Y.<sup>1</sup>, Santybayev Kh.<sup>1</sup>, Tkachenko I.M.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Faculty of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>Departamento de Matemática Aplicada, Universidad Politécnica de Valencia, Spain, Valencia,  
\*e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

### **Analysis of methods for calculating the static characteristics of dense Coulomb systems**

In this paper, various methods for calculating static characteristics of plasma, such as HNC, MHNC, VMHNC, Percus-Yevik and analytical models were analyzed to satisfy a mathematical condition. Structural characteristics of a one-component plasma were reconstructed in a wide range of coupling parameters within the most requested various modern methods (HNC, MHNC, VMHNC, Percus-Yevik, and analytical models). All these methods were analyzed to fulfill the fundamental Cauchy – Schwartz mathematical inequality. As a result a HNC method with the empirical expression of the bridge function and one of the recent methods for obtaining a structural factor based on a parameterized formula does not satisfy the inequality. The other methods for calculating static characteristics listed above beside the stated ones satisfy the condition. For the general analysis of a method, functional dependence was

obtained expressing the Cauchy-Schwartz inequality. This dependence includes the frequency moments, which are defined within the framework of the method of moments. To satisfy the inequality, this relationship must be strictly positive. For each considered method of obtaining static structural characteristics, this relationship was calculated and analyzed. As a result, it was found that a number of methods do not satisfy the Cauchy-Schwartz inequality.

**Key words:** one-component plasma, Coulomb system, hyper-netted chain approximation, Ornstein-Zernike integral equation, Cauchy-Schwarz inequality.

Архипов Ю.В.<sup>1</sup>, Асқарұлы Ә.<sup>1</sup>, Ашықбаева Ә.Б.<sup>1</sup>, Давлетов А.Е.<sup>1</sup>,  
Дубовцев Д.Ю.<sup>1</sup>, Сантыбаев Х.<sup>1</sup>, Ткаченко И.М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті,  
Эксперименттік және теориялық физика ҒЗИ, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Валенсия Политехникалық Университетінің таза және  
қолданбалы математика институты, Испания, Валенсия қ.,  
e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

### Тығыз кулондық жүйелердің статикалық сипаттамаларын есептеу әдістерін талдау

Осы мақалада статикалық сипаттамаларды есептеу барысында әртүрлі әдістердің (НСС, МНСС, VMНСС, Перкус-Йевик және аналитикалық модельдер) талдауы жүргізілді. Әртүрлі заманауи әдістер арқылы (НСС, МНСС, VMНСС, Перкус-Йевик және аналитикалық модельдер) кең ауқымда байланыс параметрімен бір компонентті плазманың құрылымдық сипаттамалары алынды. Барлық осы әдістер фундаменталды математикалық Коши-Шварц теңсіздігін орындау үшін талданды. Нәтижесінде көпіді түзету функциясының эмперикалық формуласы бар НСС әдістері және фитингтік формулалар негізіндегі құрылымдық факторларды алу тәсілдерінің бірі Коши-Шварц теңсіздігін қанағаттандырмайды. Жоғарыда аталған құрылымдық сипаттамаларды есептеудің басқа әдістері жоғарыда көрсетілген теңсіздікті қамтамасыз етеді. Талдау жұмысын жүргізу үшін Коши-Шварц теңсіздігін сипаттайтын функционалдық тәуелділік алынды. Бұл тәуелділік әдістер аумағында анықталатын жиіліктерді қамтиды. Теңсіздікті қанағаттандыру үшін бұл қатынас қатаң түрде оң болуы керек. Статикалық-құрылымдық сипаттамаларды алатын әрбір қарастырылған әдістер үшін бұл тәуелділік құрылды және талданды. Нәтижесінде бірқатар әдістер Коши-Шварц теңсіздігін қанағаттандырмайтынғы анықталды.

**Түйін сөздер:** бір компонентті плазма, кулондық жүйе, гипертізбекті жуықтау әдісі, Орнштейн-Церниктің интегралдық теңдеуі, Коши-Шварц теңсіздігі.

### Введение

В связи с интенсивным развитием техники и энергоемких технологий, в последние десятилетия, наряду с расширением возможностей традиционных источников развиваются различные альтернативные источники энергии. Одним из таких направлений альтернативной энергетики является термоядерная энергетика [1].

В настоящее время существует два известных типа установок, в основе которых лежит получение термоядерной энергии это – магнитное удержание плазмы и инерциальный синтез. Учеными различных стран построено большое количество установок для изучения реализации условий развития термоядерного синтеза. Установки с магнитным удержанием – это, в основном, ТОКАМАКИ, работа устройств инерционного синтеза основана на взаимодействии интенсивных лазерных пучков, или потоков ионов с термоядерной мишенью [1].

Исходя из трудности практической реализации реакции управляемого термоядерного синтеза, учеными было разработано большое количество теоретических моделей, которые позволяют описывать физические процессы, происходящие внутри термоядерных установок [2].

Среди широкого многообразия существуют три основных метода исследования свойств кулоновских систем. К ним относятся математическое моделирование – метод молекулярной динамики (МД), позволяющий рассчитывать как динамические, так и статические характеристики и метод Монте-Карло (МС) – статические характеристики [3-4]. Кроме того, существует аналитический подход, который предполагает решение интегральных уравнений Орнштейна-Церника и Перкуса-Йевика [5]. Метод гиперцепного приближения позволяет численно решать эти уравнения. Гиперцепное приближение (ГЦП) позволяет рассчитать структурные характеристики плазмы: радиальную функцию

распределения, статический структурный фактор. Радиальная функция распределения применяется для вычисления термодинамических характеристик – давления и внутренней энергии.

Быстро развивающийся в последнее время, сравнительно новый метод моментов позволяет определять динамические характеристики плотной плазмы, например, динамический структурный фактор, по известным статическим. То есть точный расчет статических структурных факторов и корреляционных функций позволяет верно вычислять динамические структурные факторы, дисперсию и диссипацию волн в плазме [6-9].

Целью настоящей заметки является анализ известных методов определения статических структурных факторов HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевики и аналитических моделей с точки зрения выполнения известных математических соотношений.

### Параметры плазмы

В данной работе рассматривается неидеальная, однокомпонентная, полностью ионизованная, невырожденная плазма, характеризующаяся безразмерным параметром связи  $\Gamma$ :

$$\Gamma = \frac{e^2}{ak_B T}, \quad (1)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $a = \sqrt[3]{3/4\pi n}$  – радиус Вигнера–Зейца,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$ ,  $n$  – температура и плотность.

В качестве потенциала межчастичного потенциала взаимодействия использован потенциал Кулона

$$\varphi(r) = \frac{e^2}{r}. \quad (2)$$

### Метод гиперцепного приближения

Статические корреляционные функции, в частности, можно вычислить с помощью интегрального уравнения Орнштейна–Цернике (ОЦ) в гиперцепном приближении [5]. Из формализма функционала плотности известно, что полная корреляционная функция [7], которая определяется через радиальную функцию распределения  $g_{ab}(r)$ ,

$$h_{ab}(r) = g_{ab}(r) - 1, \quad (3)$$

связана с прямой корреляционной функцией  $c_{ab}(r)$  с помощью соотношения ОЦ:

$$h_{ab}(r) = c_{ab}(r) + \sum_d n_d \int d\mathbf{r}' h_{ad}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) c_{db}(r'), \quad (4)$$

где  $n_d$  – концентрация частиц сорта  $d$ .

Гиперцепное приближение определяет радиальную функцию распределения в следующем виде

$$g_{ab}(r) = \exp[-\beta\varphi_{ab}(r) + h_{ab}(r) - c_{ab}(r)], \quad (5)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ , а  $\varphi_{ab}(r)$  – потенциал взаимодействия частиц сорта  $a$  и  $b$ .

Уравнения (4)–(5) являются замкнутой системой уравнений и могут быть рассчитаны численно до необходимой точности. Численное решение уравнения ОЦ в гиперцепном приближении можно получить при помощи прямого/обратного преобразования Фурье.

Основная численная схема метода может быть записана в следующем виде:

$$\tilde{N}_s = \frac{\tilde{C}}{(1-\rho\tilde{C})} - C_s$$

$$g(r) = \exp[N_s(r) - u_s(r)], \quad (6)$$

$$C_s(r) = g(r) - 1 - N_s(r)$$

где

$$u_s(r) = u(r) - u_l(r)$$

$$C_s(r) = C(r) + u_l(r), \quad (7)$$

$$N_s(r) = N(r) - u_l(r)$$

уравнения, благодаря которым основные уравнения (6) в итерационном блоке сходятся быстрее и таким образом позволяет сократить время и количество итераций. При этом  $N(r)$  – представляет собой сумму узловых диаграмм:

$$N(r) = h(r) - C(r), \quad (8)$$

а  $\rho$  – числовая плотность, значками “ $\tilde{\phantom{x}}$ ” над величинами обозначены Фурье-образы этих величин.

При правильном подборе функции  $u_l(r)$ , данная система уравнений (6–7) решается численно путем итераций до необходимой точности. Трудность данного метода заключается в получении сходящегося решения по мере возрастания  $\Gamma$ . Таким образом, для более устойчивой итерационной схемы, функция  $C_s(r)$  должна обеспечивать сходимость при переходе в Фурье–пространство, а ее начальные значения по мере возрастания определяются на основе значений при малых параметрах связи с помощью линейной экстраполяции. Для получения более точного решения, достаточно выполнения неравенства

$$C_{rms} \equiv \left\{ \int |C^{(out)}(r) - C^{(in)}(r)|^2 dr \right\}^{1/2} < 10^{-10} \Gamma. \quad (9)$$

Для улучшения результатов решения уравнения ОЦ (4–5) применяют мостиковые поправки, т.е., более точное выражение для радиальной функции распределения выглядит следующим образом:

$$g_{\alpha\beta}(r) = \exp[-\beta v_{\alpha\beta}(r) + N_{\alpha\beta}(r) + B_{\alpha\beta}(r)], \quad (10)$$

где  $B_{\alpha\beta}(r)$  – сумма мостиковых диаграмм.

Тогда для решения уравнения нужно переписать уравнения (6), связывающие корреляционные функции с учетом мостиковых поправок в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tilde{N}_s &= \frac{\tilde{C}}{(1 - \rho\tilde{C})} - \tilde{C} \\ g(r) &= \exp[B(r) + N_s(r) - u_s(r)], \quad (11) \\ C_s(r) &= g(r) - 1 - N_s(r) \end{aligned}$$

Радиальная функция распределения имеет следующий вид

$$g(r) = \exp[-u(r) + N(r) + B(r)], \quad (12)$$

где  $B(r)$  – сумма мостиковых диаграмм. Согласно [5], эмпирическая формула для функции мостиковой поправки в приближении Дебая-Хюккеля может быть представлена в виде

$$B(r) = -\lambda\Gamma / r, \quad (13)$$

где параметр  $\lambda = 0.6 \operatorname{erf}(0.024\Gamma)$  имеет малые значения при малых  $\Gamma$ .

Одной из основных экспериментальных характеристик плотной плазмы является статический структурный фактор [10], который определяется как Фурье–образ радиальной функции распределения:

$$S_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} + n \int d\vec{r} [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (14)$$

Далее получены и проанализированы радиальные функции распределения и статические структурные факторы в гиперцепном приближении для плазмы с учетом эмпирической суммы мостиковых диаграмм [5].

На рисунках 1–2 приведены графики радиальной функции распределения при различных параметрах плазмы, полученные методом гиперцепного приближения (сплошная линия) и методом Монте-Карло (точки).

Из графиков видно, что радиальная функция распределения, рассчитанная методом ННС, находится в определенном согласии с радиальной функцией распределения, рассчитанной методом МС при различных параметрах неидеальности плазмы.

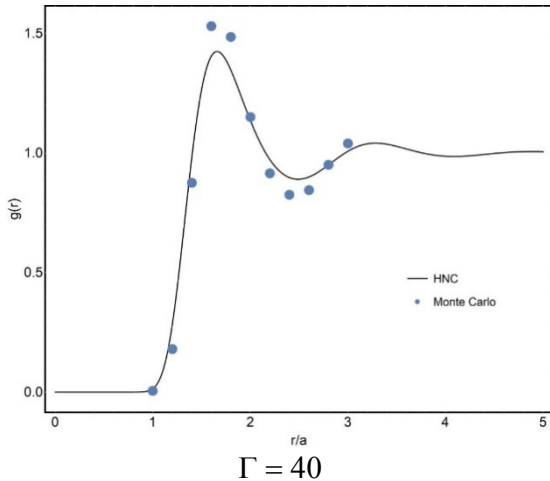


Рисунок 1 – Радиальная функция распределения  $\Gamma = 40$

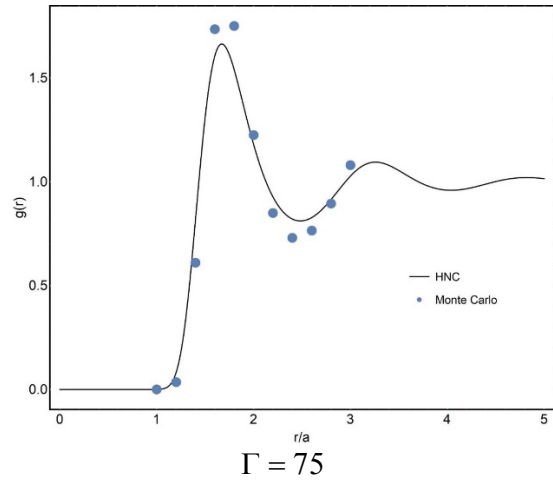


Рисунок 2 – Радиальная функция распределения  $\Gamma = 75$

### Модифицированный метод гиперцепного приближения (MHNC)

Два самых важных метода интегрального исчисления ведут к уравнению Перкуса-Йевика и уравнениям гиперцепного приближения. Оба они могут быть получены диаграммным анализом  $g(r)$ , при этом игнорируя определенный класс диаграмм. Понятно, что если известна функция той диаграммы, которая не была учтена, то можно

записать модифицированные интегральные уравнения и получить новую радиальную функцию распределения  $g(r)$ . В теории Перкуса-Йевика и гиперцепном приближении, диаграммный метод интегральных уравнений хорошо сформулирован. В то же время, существуют гибридные и смешанные методы интегрального исчисления, в которых диаграммный базис менее отчетливый.

Интегральное уравнение Перкуса-Йевика для твердых сфер записывается в виде [11]

$$\tau(\vec{r}) = 1 + n \int_{|\vec{r}'| < R} \tau(\vec{r}') d\vec{r}' - n \int_{|\vec{r}'| < R, |\vec{r} - \vec{r}'| > R} \tau(\vec{r}') \tau(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}', \quad (15)$$

где  $R$  диаметр твердой сферы,  $n$  плотность частиц. Функция  $\tau(\vec{r})$  относится к прямой корреляционной функции и радиальной функции распределения уравнения Орнштейн-Цернике следующим образом

$$\begin{aligned} g(\vec{r}) &= 0 & (r < R), \\ g(\vec{r}) &= \tau(\vec{r}) & (r > R), \\ C(\vec{r}) &= -\tau(\vec{r}) & (r < R), \\ C(\vec{r}) &= 0 & (r > R). \end{aligned} \quad (16)$$

Прямая корреляционная функция [12] определяется из следующего соотношения

$$C_{PY}(x) = -(1 - \eta)^{-4} [(1 + 2\eta)^2 - 6\eta(1 + \frac{1}{2}\eta)^2 x + \eta(1 + 2\eta)^2 \frac{1}{2}\eta x^3], \quad (17)$$

где  $x = (r/R)$ ,  $\eta$  – упаковочный параметр.

Радиальная функция распределения для твердых сфер в однородном нейтральном фоне может быть найдена в виде [13]

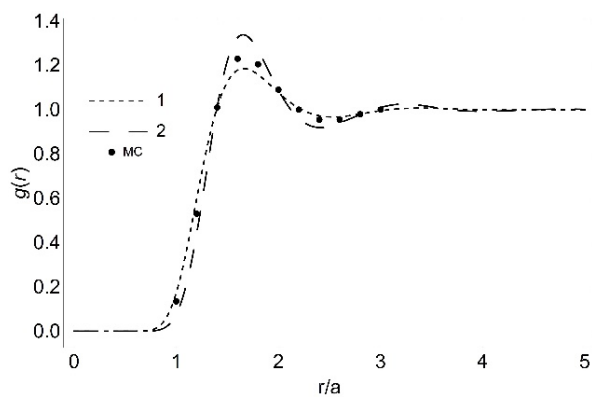
$$\tilde{g}_0(k) = \frac{\tilde{C}(k)}{1 - \rho \tilde{C}(k)}. \quad (18)$$

$$g_{PY}(r) = g_0(r) + 1$$

Далее зная радиальную функцию распределения для твердых сфер, можно получить функцию мостиковых поправок [14]

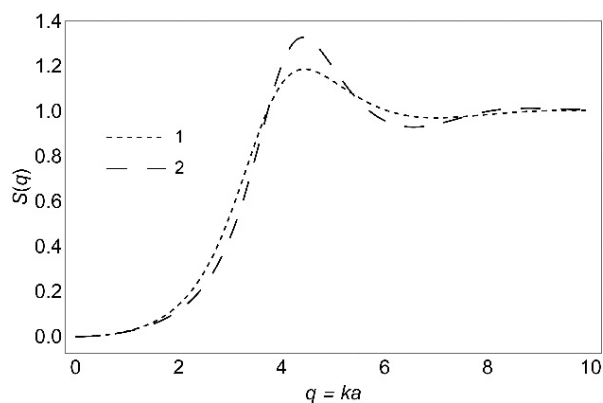
$$B(x, \eta) = y_{PY}(x, \eta) - 1 - \ln y_{PY}(x, \eta). \quad (19)$$

Графики радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученные в рамках модифицированного гиперцепного приближения при различных параметрах связи приведены на рисунках 3-8.



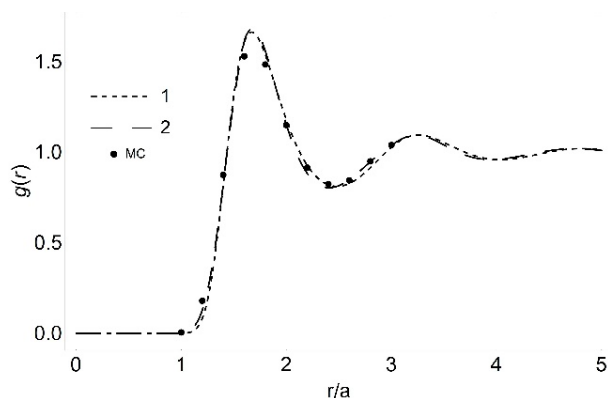
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 3** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



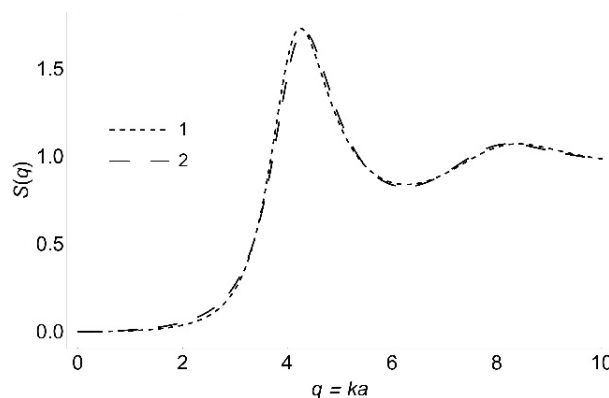
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 4** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала



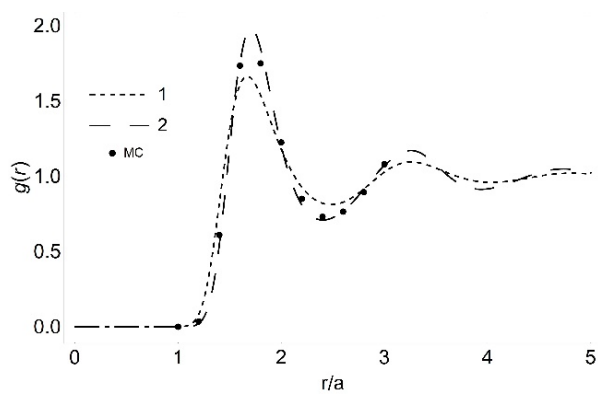
$\Gamma = 40$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 5** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



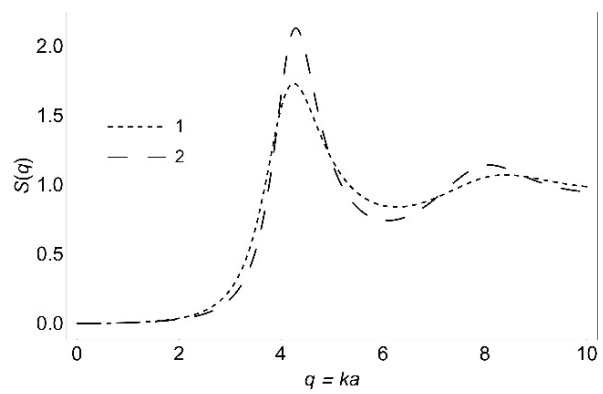
$\Gamma = 40$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 6** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала



$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 7** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 8** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала



Из графиков видно, что радиальная функция распределения и статический структурный фактор, рассчитанные методом МННС находятся в лучшем согласии с методом МС по сравнению с методом ННС.

**Вариационный модифицированный метод гиперцепного приближения (VMHNC)**

Процедура получения [15]  $g(r)$  для заданного потенциала  $\phi(r)$  с температурой  $\beta$  и плотностью  $\rho_i$  происходит следующим образом. Решаются уравнения МННС используя  $B_{HSPY}(r, \eta)$  для различных значений  $\eta$ :

$$h(r) = c(r) + \rho_i \int dr' h(|r-r'|)c(r'),$$

$$\ln[g(r)] = -\beta\phi(r) + h(r) - c(r) + B_{HSPY}(r, \eta), \quad (20)$$

$$h(r) = g(r) - 1.$$

Здесь необходимо варьировать значение  $\eta$  до тех пор, пока избыточная свободная энергия  $f_{\phi}^{VMHNC}(\beta, \rho_i, \eta) = \beta F(\beta, \rho_i, \eta) / N$  не примет минимальное значение при определенном значении  $\eta = \eta_{eff}$ . Радиальная функция распределения является решением уравнений МННС с мостиковой поправкой  $B_{HSPY}(r, \eta)$  и избыточной свободной энергией системы [16].

Один из вариантов решения уравнений МННС использовать метод Ng [5] для ОКП систем, который заключается в отображении дальнедействующей системы в короткодействующую. В случае с юкавовской однокомпонентной плазмы (ЮОКП), эта процедура заключается в представлении потенциала Юкавы  $u_Y(r)$  [6] в виде суммы двух членов, дальнедействующего потенциала  $u_{Y,L}(r)$  и короткодействующего потенциала  $u_{Y,S}(r)$ . В силу асимптотического поведения прямой корреляционной функции  $c(r)$ , потенциал  $-u_{Y,L}(r)$  может быть взят в виде дальнедействующей части  $c(r)$ . В таком случае

вводят короткодействующую часть прямой корреляционной функции  $c_S(r)$

$$c(r) = c_S(r) - u_{Y,L}(r). \quad (21)$$

Далее потенциалы  $u_{Y,L}(r)$  и  $u_{Y,S}(r)$  переписываются с использованием интегралов ошибок в следующем виде. Тогда, согласно методике изложенной в работе [5]

$$u_{Y,L}(r) = u_Y(r) \operatorname{erf}(\alpha_{NG} r)$$

$$u_{Y,S}(r) = u_Y(r) \operatorname{erfc}(\alpha_{NG} r), \quad (22)$$

$$u_Y(r) = u_{Y,L}(r) + u_{Y,S}(r)$$

где  $\alpha_{NG} = 1.08$ , как и для ОКП см.[5], взято в таком же виде и для ЮОКП. Для потенциала Кулона  $\kappa = 0$ ,  $u_Y(r)$  согласовывается на 99% и более с  $-c(r)$  в широком диапазоне  $r$  и  $\Gamma$ .

Используя такое разложение уравнения МННС могут быть легко решены в единицах  $a_{ws}$

$$h(r) = -u_{Y,L}(r) - \frac{3}{4\pi} \int dr' h(|r-r'|)u_{Y,L}(r') +$$

$$+ c_S(r) + \frac{3}{4\pi} \int dr' h(|r-r'|)c_S(r'), \quad (23)$$

$$\ln[g(r)] = -u_{Y,S}(r) + h(r) - c_S(r) + B_{HSPY}(r),$$

для свободной энергии использовалось выражение

$$f_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta) =$$

$$= -\frac{\Gamma\kappa}{2} - \frac{3}{8\pi} \int dr \left[ -\frac{1}{2} h(r)^2 - h(r)u_{Y,L}(r) + \right. \quad (24)$$

$$\left. + g(r)c_S(r) + u_{Y,S}(r) \right] - \frac{1}{12} \pi^2 \int dk \times$$

$$\times \{ \ln[1 + \tilde{h}(k)] - \tilde{h}(k) \} + \delta_{\phi}(\eta) + \Delta_{PY}(\eta).$$

Ниже приведены рассчитанные данные для параметра  $\eta_{eff}$  при различных  $\kappa$  и  $\Gamma$ .

**Таблица 1** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  при  $k = 0$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

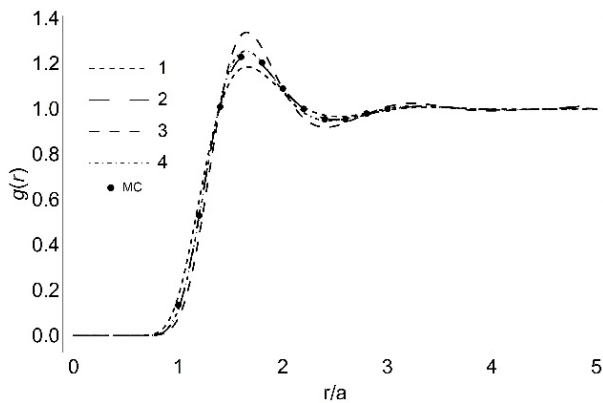
$k = 0$	$\Gamma = 5$	$\Gamma = 10$	$\Gamma = 16$	$\Gamma = 20$	$\Gamma = 35$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 65$	$\Gamma = 75$	$\Gamma = 80$
$\eta_{eff}$	0,17	0,21	0,26	0,28	0,29	0,31	0,37	0,37	0,43

**Таблица 2** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  и соответствующие значения свободной энергии при  $k = 1$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

$k = 1$	$\Gamma = 30$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 100$
$\eta_{eff}$	0.28	0.29	0.36
$\int_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta)$	-27.0989	-46.217	-94.6465

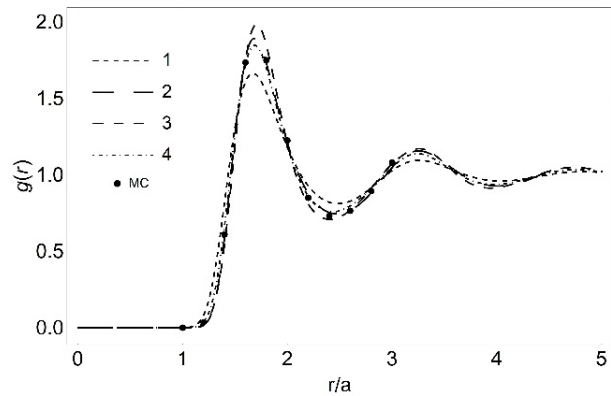
**Таблица 3** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  и соответствующие значения свободной энергии при  $k = 3$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

$k = 2$	$\Gamma = 30$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 100$
$\eta_{eff}$	0.25	0.27	0.31
$\int_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta)$	-36.1967	-60.9926	-123.396



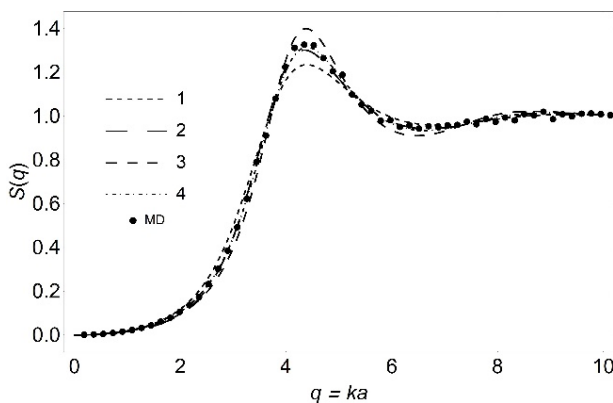
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MC

**Рисунок 9** – Сравнение радиальных функций распределения, полученных различными методами в кулоновской системе



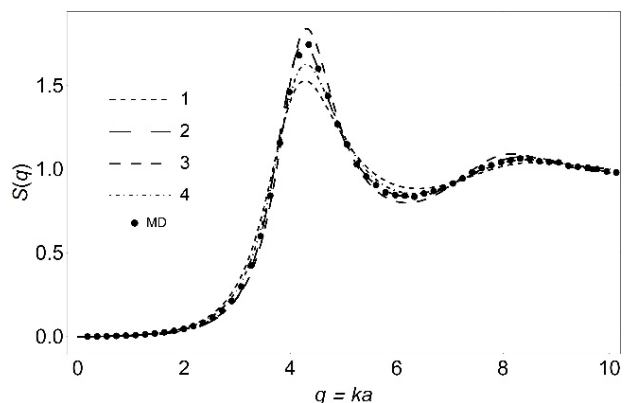
$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MC

**Рисунок 10** – Сравнение радиальных функций распределения, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 20$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MD

**Рисунок 11** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 50$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MD

**Рисунок 12** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе



Графики радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученные в рамках вариационного модифицированного гиперцепного приближения при различных параметрах связи приведены на рисунках 9-12.

Из графиков видно, что радиальная функция распределения и статический структурный фактор рассчитанные методом VMHNC находятся в отличном согласии с методами MC и MD.

### Некоторые эмпирические формулы статического структурного фактора

Парная функция распределения и статический структурный фактор однокомпонентной кулоновской системы были представлена в [17] в параметризованном виде как функции параметра связи  $\Gamma$ . Эти функции основаны на компьютерных симуляциях молекулярной динамики, которые захватывают весь диапазон жидкой фазы ( $0 \leq \Gamma \leq 180$ ). В данной работе использовались разные формы параметризованных функций для слабо и сильно связанных систем. Для параметра связи  $\Gamma < 5$ , в слабо связанной системе, формула для радиальной функции распределения  $g_{weak}(r)$  включает в себя нелинейный вклад Дебая-Хюкеля, в то время как, в сильно связанной системе, форма  $g_{strong}(r)$  учитывает осцилляции после первого пика  $g(r)$  и их последующие затухания:

$$g_{fit}(r) = \begin{cases} g_{weak}(r), & \Gamma \leq 5, \\ g_{strong}(r), & \Gamma > 5, \end{cases} \quad (25)$$

$$g_{weak}(r) = e^{-\frac{\rho}{r}} e^{-\eta r} + \chi e^{-\frac{(r-\rho)^2}{\tau}}, \quad (26)$$

$$g_{strong}(r) = \begin{cases} \sigma e^{-\mu(-x)^\nu}, & x \leq 0, \\ 1 + (\sigma - 1) \frac{\cos(\alpha x + \beta \sqrt{x})}{\cosh(x\Lambda(x))}, & x > 0 \end{cases}, \quad (27)$$

$$x = \frac{r}{\zeta} - 1, \quad (28)$$

$$\Lambda(x) = (\delta - \varepsilon) \exp\left(-\sqrt{\frac{x}{\gamma}}\right) + \varepsilon, \quad (29)$$

здесь, расстояние  $r$  измеряется в единицах радиуса Вигнера-Зейца  $a$ .

Параметризованный вид функции статического структурного фактора, приведенный там же, имеет следующий вид:

$$S_{fit}(k) = \begin{cases} S_H(k), & \Gamma \geq 60, \\ S_L(k), & \Gamma < 60, \end{cases}, \quad (30)$$

$$S_H(k) = \begin{cases} S_i(k), & k \geq k_-, \\ S_{high}(k), & \end{cases}, \quad (31)$$

$$S_L(k) = S_i(k)W(k) + S_{low}(k)(1 - W(k)), \quad (32)$$

$$S_{high}(k) = \frac{S_m \left(\frac{k}{k_m}\right)^2}{1 + \omega(k - k_m)^2},$$

$$S_{low}(k) = \frac{k^2}{k^2 + 3\Gamma}, \quad (33)$$

$$W(k) = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh\left(\frac{k - k_t}{\delta k}\right) \right),$$

$k_-$  определяется как

$k_- = \arg \max_k (S_{high}(k) \geq S_i(k))$ ,  $S_i(k)$  – ионный структурный фактор,

Кроме параметризованных формул для радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученных в статье [17], был проведен анализ результатов работы [18], в которой получены эмпирические формулы для статического структурного фактора. В последней статье, формула статического структурного фактора  $S(k)$  была получена на основе значений  $S(k)$  протабулированных в [15], в рамках модифицированного метода гиперцепного приближения для однокомпонентной кулоновской системы.

Из данных [18] формула для статического структурного фактора имеет вид:

$$S(q, \Gamma) = \frac{1}{1 + 3\Gamma / q^2 - c_s(q, \Gamma)}. \quad (34)$$

Входящая в знаменатель правой части функция  $c_s(q, \Gamma)$  привносит осцилляции в функцию  $S(q, \Gamma)$ . В связи с этим, функция  $c_s(q, \Gamma)$  разбивается на сегментные кусочки, каждый из которых отвечает пикам, наблюдаемым в функции  $S(q, \Gamma)$ .

Также, были проанализированы формулы, предложенным в [15]. Здесь рассмотрена юкавовская сильносвязанная система, а радиальная функция распределения определяется по формуле

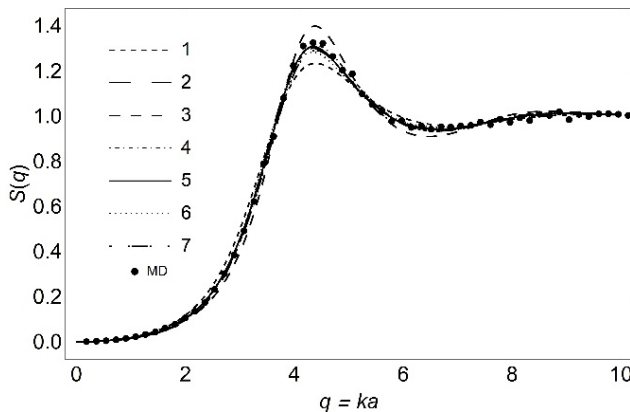
$$g(r) = \exp[-\beta u(r) + h(r) - c(r) + B(r)], \quad (35)$$

где  $B(r)$  – функция мостиковой поправки:

$$B(r) = B_{OCP}(\Gamma, r) \exp\left(-\frac{k^2}{4}\right). \quad (36)$$

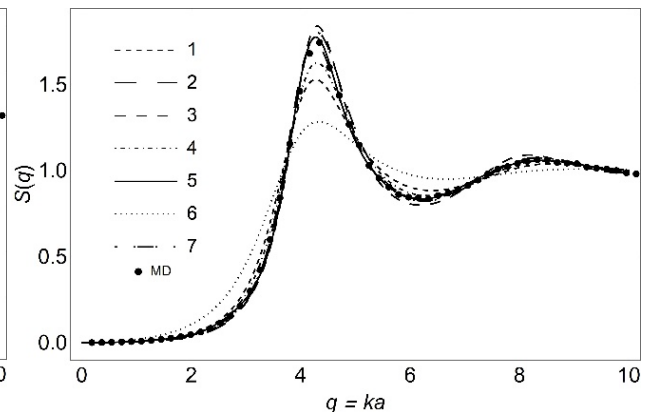
Формула (36) в отдельных случаях дает отличное согласие с МД моделированием и удовлетворяет правилу сумм сжимаемости. Для однокомпонентной кулоновской системы используется функция мостиковой поправки  $B_{OCP}(\Gamma, r)$ , определяемая по формулам из [20].

На рисунках 13-14 представлены сравнительные графики статических структурных, которые рассчитаны на основе аналитических методов и на основе вышеприведенных фитинговых формул.



$\Gamma = 20$ , 1 – HNC, 2 – HNC [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [15], 6 – [18], 7 – [16], точки – МД.

**Рисунок 13** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 50$ , 1 – HNC, 2 – HNC [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [15], 6 – [18], 7 – [16], точки – МД.

**Рисунок 14** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе

Из графиков видно, что статические структурные факторы, рассчитанные на основе фитинговых формул хорошо согласуются с данными, полученными методом VMHNC.

### Метод моментов. Неравенство Коши-Шварца

Особое место среди методов исследования плотных кулоновских систем занимает метод моментов. Суть его состоит в том, что, как показано в работах [6,7,20], функция линейного отклика системы заряженных частиц, то есть обратная диэлектрическая функция, может быть восстановлена по первым нерасходящимся

моментам мнимой части последней. Эти моменты являются коэффициентами асимптотического разложения обратной диэлектрической функции на высоких частотах. При этом, так называемая, функция-параметр Неванлинны, фигурирующая в соответствующей формуле теории моментов и обладающая определенными математическими свойствами, моделируется из простых физических соображений так, чтобы давать «правильное» значение некоторой статической характеристики плазмы на нулевой частоте, например, статической проводимости. При этом основной задачей метода является прямое вычисление степенных моментов, на основе теории линейного отклика, через

статические структурные характеристики системы.

Основным достоинством метода моментов является то, что он позволяет определять динамические структурные факторы по рассчитанным статическим характеристикам, задавая определенный вид функции-параметра Неванлинны. Особую привлекательность придает возможность проведения расчетов для жидких непертурбативных систем при любых параметрах связи  $\Gamma$ . При этом не требуется проводить никакого разложения по степени неидеальности, как, например, в кинетической теории.

Метод моментов в ОКП позволяет оперировать любым числом сходящихся правил сумм [21-25]:

$$S_\nu(k) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu S(k, \omega) d\omega, \quad \nu = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (37)$$

Нулевой момент, очевидно, равен статическому структурному фактору  $S_0(k) = S(k)$ , тогда как второй момент представляет собой правило сумм

$$S_2(k) = \omega_0^2(k) = \omega_p^2 \left( \frac{k^2}{k_D^2} \right) = \omega_p^2 \left( \frac{q^2}{3\Gamma} \right), \quad (38)$$

а четвертый момент имеет вид,

$$S_4(q) = \omega_p^2 \omega_0^2(q) \left\{ 1 + \frac{q^2}{\Gamma} + U(q) \right\}. \quad (39)$$

Здесь  $q = ka$ ,  $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}$  обозначает

плазменную частоту и  $k_D = \sqrt{\frac{4\pi n e^2 Z^2 \beta}{m}}$  обратная длине волны Дебая, масса  $m$ , и слагаемое, описывающее вклад потенциальных взаимодействий

$$U(q) = \frac{1}{4\pi^2 n} \int_0^\infty [S(k') - 1] f(k'; k) k'^2 dk' = \frac{1}{3\pi} \int_0^\infty [S(p) - 1] f(p; q) p^2 dp, \quad (40)$$

где использовано обозначение

$$f(p; q) = \frac{5}{6} - \frac{p^2}{2q^2} + \left( \frac{p^3}{4q^3} - \frac{p}{2q} + \frac{q}{4p} \right) \ln \left| \frac{q+p}{q-p} \right|, \quad (41)$$

$$q = ka$$

$$p = k'a. \quad (42)$$

Частоты  $\omega_1(k)$  и  $\omega_2(k)$  определяются соответствующими отношениями моментов [21-25]:

$$\omega_1^2 = \omega_1^2(k) = \frac{S_2(k)}{S_0(k)} \quad (43)$$

$$\omega_2^2 = \omega_2^2(k) = \frac{S_4(k)}{S_2(k)}. \quad (44)$$

Здесь, важным условием является соблюдение неравенства Коши-Шварца [6,19], которое удобно переписать через моментные частоты в виде

$$b(q, \kappa) = \omega_2(q, \kappa) - \omega_1(q, \kappa) > 0. \quad (45)$$

На рисунке 15 построен график функции  $b(q, \kappa)$  для различных методов, где 1 – HNC, 2 – HNC с бриджфункцией [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [17], 6 – [20], 7 – [18].

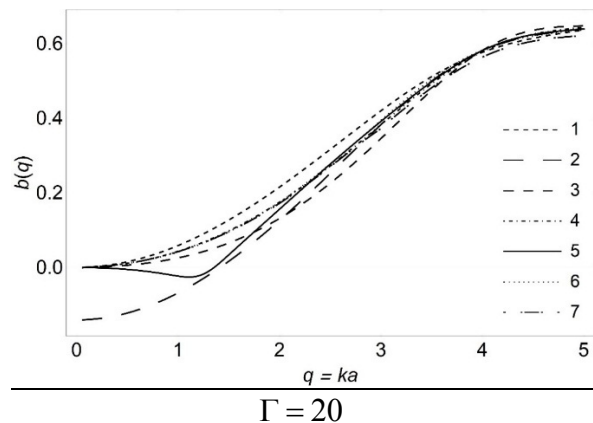


Рисунок 15 – Функция  $b(q, \kappa)$  для различных методов в кулоновской системе

Таким образом, используя неравенство (45) нетрудно проверить выполняется ли искомое неравенство для выбираемых методик расчета статических корреляционных характеристик (корреляционных функций, статических структурных факторов). Выполнение неравенства

свидетельствует о правильности выбранного метода расчета.

Графический анализ, показанный на рисунке 15, проведенный для вышеописанных методов расчета (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевики и аналитических моделей), показал, что использование функциональной зависимости  $b(q, k)$  (45), включающей в себя частотные моменты, которые определяются в рамках метода моментов, приводит к следующему выводу.

### Заключение

В данной работе были проанализированы методы получения статических структурных факторов, а именно, решение интегральных уравнений Орнштейн-Цернике и Перкуса-

Йевики, методы VMHNC, а также фитинговые формулы. Показано, что кроме фитинговых соотношений из [17], и метода гиперцепного приближения с учетом эмпирической формулы функции мостиковой поправки согласно [5], остальные методы дают выражения для корреляционных функций, удовлетворяющие неравенству Коши-Шварца: метод гиперцепного приближения согласно [5], модифицированный метод гиперцепного приближения согласно [18], вариационный модифицированный метод гиперцепного прилижения согласно [16], эмпирические формулы работ [18-20].

**Благодарности.** Работа поддержана грантом Министерства образования и науки Республики Казахстан № AP05132333.

### Литература

- 1 Баимбетов Ф.Б. и др. Основы физики управляемого термоядерного синтеза.-Алматы-Курчатов. – 2004. – 232 с.
- 2 Архипов Ю.В., Баимбетов Ф.Б., Давлетов А.Е., Стариков К.В. Псевдопотенциальная теория плотной высокотемпературной плазмы. – Алматы: «Қазақ Университеті», 2002. – 113 с.
- 3 Binder, K. & Heermann, D.W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction (4th edition).- Springer. – 2002.- ISBN 3-540-43221-3.
- 4 M. Griebel; S. Knapek; G. Zumbusch Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Berlin, Heidelberg. – Springer. – 2007. – ISBN 978-3-540-68094-9.
- 5 Ng K.–Ch. Hypernetted chain solutions for the classical one–component plasma up to  $\Gamma = 7000$  // J. Chem. Phys. – 1974. – Vol. 61. – P. 2680–2689.
- 6 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Davletov A.E., Dubovtsev D.Yu., Donko Z., Hartmann P., Korolov I. Conde L. and Tkachenko I.M. Direct determination of dynamic properties of Coulomb and Yukawa one-component plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol 119. – P. 045001.
- 7 Adamjan S.V., Tkachenko I.M., Munoz–Cobo Gonzalez J.L., Verdu Martin G. Dynamic and static correlations in model Coulomb systems // Phys. Rev. E. – 1993. – Vol. 48. – P. 2067–2072.
- 8 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Optical properties of Kelbg-pseudopotential-modelled plasmas // Contributions to Plasma Physics – 2013. – Vol. 53. – P. 375-384.
- 9 Архипов Ю.В., Ашикбаева А.Б., Аскарулы А., Ткаченко И.М. Исследование диэлектрических функций плотной плазмы // Международная научная конференция «Актуальные проблемы современной физики» – Алматы, 2013. – С. 169
- 10 Марч Н., Тоси М. Движение атомов жидкости. – М.: Металлургия, 1980. – 296 с.
- 11 Wertheim M. S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres // Phys. Rev. Lett. – 1963. – Vol. 10. – P. 321
- 12 G. Faussurier. Gibbs-Bogolyubov inequality and transport properties for strongly coupled Yukawa fluids // Phys. Rev. E. – 2003. – Vol. 67. – P. 046404
- 13 Lado F. Charged hard spheres in a uniform neutralizing background using ‘mixed’ integral equations // Mol. Phys. – 1976. – Vol. 31. – P 1117.
- 14 Rosenfeld Y. Comments on the Variational Modified-Hypernetted-Chain Theory for Simple Fluids // J. Stat. Phys. – 1986. – Vol. 42. – P. 437.
- 15 Rosenfeld Y., Aschcroft N.W. Theory of simple classical fluids: Universality in the short–range structure // Phys.Rev.A. – 1979. – Vol.20. – P. 1208–1235.
- 16 Faussurier G. Description of strongly coupled Yukawa fluids using the Variational modified hypernetted chain approach // Phys. Rev. E. – 2004. – Vol. 69. – P 066402.
- 17 Desbiens N. et al. Parametrization of pair correlation function and static structure factor of the one component plasma across coupling regimes // Physics of Plasma. – 2016. – Vol 23. – P. 092120.
- 18 Young D. A. et al. Analytic fit to the one-component-plasma structure factor. // Phys. Rev. A. – 1991. – Vol. 44. – P. 6508.
- 19 Daughton W., Murillo M.S., Thode L. Empirical bridge function for strongly coupled Yukawa systems // Phys. Rev. E. – 2000. – Vol 61. – No 2. – P.2129-2132.
- 20 Iyetomi H., Ogata Sh, Ichimaru S. Bridge functions and improvement on the hypernetted-chain approximation for classical one-component plasmas // Phys. Rev. A. – 1992. – Vol. 46. – No. 2. – P 1051-1058.
- 21 Tkachenko I. M., Arkhipov Yu .V., Askaruly A. // The Method Of Moments and its Applications in Plasma Physics // Lambert Academic Publishing. Saarbrucken. Germany. – 2012. – 125 p.

- 22 Tkachenko I.M., Alcober J. and Fernandez de Cordoba P. Electronic correlations in real and model plasmas // J.Phys. IV France. – 2000. – Vol. 10. – P. 199-202.
- 23 Arkhipov Yu.V., A.B. Ashikbayeva, Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Dynamic conductivity of Kelbg-pseudopotential – modeled plasmas // International Journal of Mathematics and Physics – Алматы, 2013. – Vol. 4. – P. 38-43.
- 24 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Voronkov V.V., Tkachenko I.M. Statical structural properties of nonideal plasma // International Journal of Mathematics and Physics. – Almaty, 2013. – Vol.4, № 1. – P. 80-84.
- 25 Adamyan V. M., Tkachenko I.M. Sum rules and exact relations for quantal Coulomb systems // Contrib. Plasma Phys. – 2003. – Vol. 43. – P. 252-257.

### References

- 1 F.B. Baimbetov i dr. Osnovy fiziki upravlyayemogo termoyadernogo sinteza. (Almaty-Kurchatov, 2004), 232 s. (in Russ).
- 2 Yu.V. Arkhipov, F.B. Baimbetov, A.Ye. Davletov, K.V. Starikov Pseudopotentsial'naya teoriya plotnoy vysokotemperaturnoy plazmy, (Qazaq, Universiteti, Almaty, 2002), 113 s. (in Russ).
- 3 K. Binder & D.W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction (4th edition), (Springer, 2002), ISBN 3-540-43221-3.
- 4 M. Griebel; S. Knapek; G. Zumbusch Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Berlin, Heidelberg, (Springer, 2007), ISBN 978-3-540-68094-9.
- 5 Ng K.–Ch. J. Chem. Phys, 61, 2680 (1974).
- 6 Yu.V. Arkhipov et al., Phys. Rev. Lett., 119, 045001 (2017).
- 7 S.V. Adamjan et al., Phys. Rev. E. 48, 2067 (1993).
- 8 Yu.V. Arkhipov et al., Contributions to Plasma Physics, 53, 375 (2013).
- 9 Yu.V. Arkhipov i dr. Mezhdunarodnaya nauchnaya konferentsiya «Aktual'nyye problemy sovremennoy fiziki», 169 (2013). (in Russ).
- 10 N. March, M. Tosi Dvizheniye atomov zhidkosti, (M.: Metallurgiya, 1980), 296 s. (in Russ).
- 11 M.S. Wertheim, Phys. Rev. Lett., 10, 321 (1963).
- 12 G. Faussurier, Phys. Rev. E., 67, 046404 (2003).
- 13 F. Lado Mol. Phys., 31, 1117 (1976).
- 14 Y. Rosenfeld, J. Stat. Phys., 42, 437 (1986).
- 15 Y. Rosenfeld, N.W. Aschcroft, Phys.Rev.A., 20, 1208 (1979).
- 16 G. Faussurier, Phys. Rev. E., 69, 066402 (2004).
- 17 N. Desbiens et al., Physics of Plasma, 23, 092120 (2016).
- 18 D.A. Young et al., Phys. Rev. A., 44, 6508 (1991).
- 19 W. Daughton et al., Phys. Rev. E., 61, 2129 (2000).
- 20 H. Iyetomi et al., Phys. Rev. A., 46, 1051 (1992).
- 21 I.M. Tkachenko, Yu.V. Arkhipov, and A.Askaruly, The Method Of Moments and its Applications in Plasma Physics, (Lambert Academic Publishing, Germany, 2012), 125 p.
- 22 I.M. Tkachenko et al., J.Phys. IV France, 10, 199 (2000).
- 23 Yu.V. Arkhipov et al., Inter. J Math. Ph., 4, 38 (2013).
- 24 Yu.V. Arkhipov et al., Inter. J Math. Ph., 4, № 1, 80 (2013).
- 25 V.M. Adamyan and I.M. Tkachenko, Contrib. Plasma Phys., 43, 252 (2003).