

Struktur in stark gekoppelten Mehrkomponenten-Plasmen

K. Wunsch¹, P. Hilde¹, M. Schlages¹ und D.O. Gericke²

¹Institut für Physik, E.-M.-Arndt-Universität Greifswald, Felix-Hausdorff-Str. 6, 17487 Greifswald, Germany

²Centre of Fusion, Space and Astrophysics, Department of Physics, University of Warwick, Coventry CV4 7AL, United Kingdom



Einleitung

Die Struktur dichter Plasmen, d.h. die radiale Verteilungsfunktion bzw. der Strukturfaktor, ist eng mit den thermodynamischen Eigenschaften des Systems verbunden. Ein Vergleich experimenteller Daten mit theoretischen Resultaten erlaubt damit Rückschlüsse auf die Plasmaparameter. Zur numerischen Bestimmung der Verteilungsfunktion bzw. des Strukturfaktors wird hier das bekannte HNC-Verfahren, d.h. die Lösung gekoppelter Integralgleichungen, auf Mehrkomponenten-Plasmen angewendet. Im Bereich starker Kopplung entsteht besonders im Ionensystem eine ausgeprägte, kurzreichweitige Struktur, deren Abhängigkeit von den Plasmaparametern an verschiedenen Beispielen diskutiert wird. Zur Beschreibung der Elektronen ist es notwendig, Quanteneffekte zu berücksichtigen; dieses wird durch die Verwendung verschiedener effektiver Potentiale approximativ erreicht. Weiterhin wird der Einfluss der gezeigten Resultate auf die Plasmadiagnostik mittels Thomson-Streuung diskutiert.

Definitionen und Basisgleichungen

- radiale Paarverteilungsfunktion:

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{n^2} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}_j) \right\rangle \quad (1)$$

- Ornstein-Zernike-Relation [1]:

$$G_{ij}(r_{12}) = C_{ij}(r_{12}) + \sum_k n_k \int d\mathbf{r}_3 C_{ik}(r_{13}) G_{kj}(r_{32}) \quad (2)$$

$C(r)$ charakterisiert die direkte und $G(r)$ die totale Korrelationsfunktion

- Hypernetted Chain Abschlussrelation (HNC):

$$g_{ij}(r_{12}) = \exp(-\beta V_{ij}(r_{12}) + G_{ij}(r_{12}) - C_{ij}(r_{12})) \quad (3)$$

- Statischer Strukturfaktor [1]:

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} + \sqrt{n_i n_j} \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) (g_{ij}(\mathbf{r}) - 1) = \delta_{ij} + \sqrt{n_i n_j} \tilde{G}_{ij}(\mathbf{k}) \quad (4)$$

$\tilde{G}(r)$ sei die Fouriertransformierte totale Korrelationsfunktion

- Mittelung der Paarverteilungsfunktion

$$\overline{g(r)} = \frac{1}{4} (g_{11} + 2g_{12} + g_{22}) \quad (5)$$

mit den einzelnen Verteilungsfunktionen g_{ij}

Wechselwirkungspotentiale

Die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen wird beschrieben durch das

- Coulomb-Potential:

$$V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) = \frac{e_a e_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \quad (6)$$

Das kollektive Verhalten im Plasma führt z.B. zu Abschirmungseffekten, die im statischen Fall durch das Potential von DEBYE und HÜCKEL beschrieben werden.

- Debye-Potential [2]:

$$V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) = \frac{e_a e_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} e^{-|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|/\lambda_D} \quad (7)$$

mit dem Abschirmradius $\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi n_e e^2}}$ und $\kappa = r_D^{-1}$

Zur approximativen Betrachtung von quantenmechanischen Effekten wurden effektive Potentiale eingeführt.

- Deutsch-Potential [4]:

$$V_{ij} = \frac{q_i q_j}{r} \left[\left(1 - \exp\left(-\frac{r}{\lambda_{ij}}\right) \right) + \delta_{ie} \delta_{je} \ln 2 \exp\left(-\frac{\ln 2}{\pi} \left(\frac{r}{\lambda_{ij}}\right)^2\right) \right] \quad (8)$$

mit der thermischen Wellenlänge $\lambda_{ij} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu_{ij} k_B T}}$ und der reduzierten Masse

$$\mu = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$$

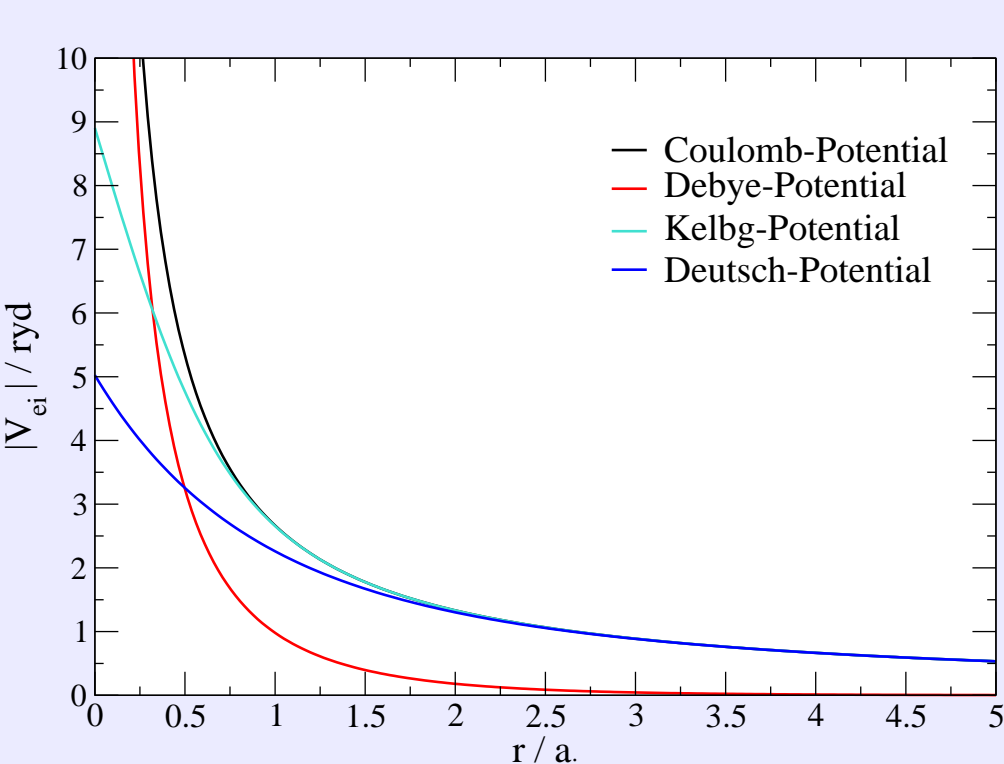
- Kelbg-Potential [5]:

$$V_{ij} = \frac{q_i q_j}{r} \left[\left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda_{ij}^2}\right) \right) + \frac{\sqrt{\pi} r}{\lambda_{ij}} \left(1 - \Phi\left(\frac{r}{\lambda_{ij}}\right) \right) \right] \quad (9)$$

mit der Gaußschen Fehlerfunktion $\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2}$

- Austausch-Potential für Elektronen [3]:

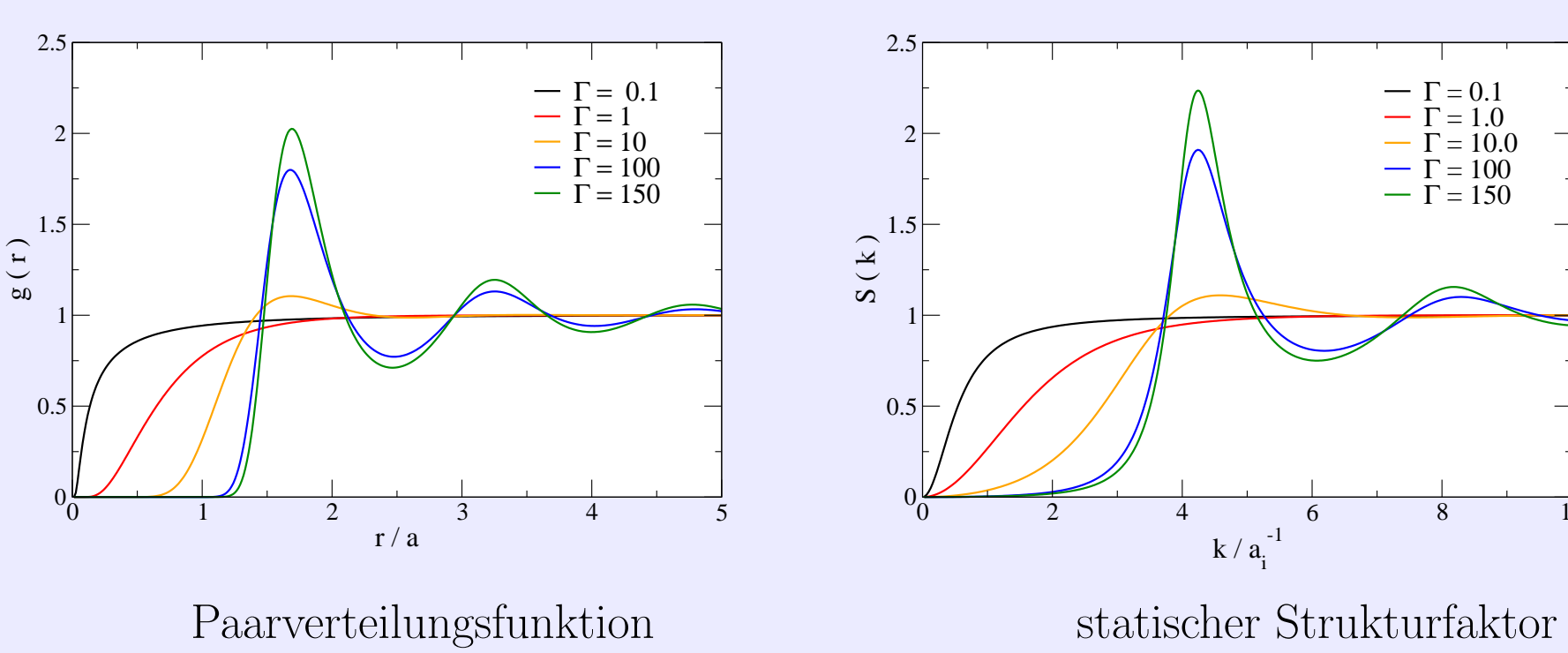
$$V_{ij} = -k_B T \ln \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2}{\lambda^2}\right) \right] \quad (10)$$



Darstellung von verschiedenen Potentialen für ein Elektron-Ion Plasma. Plasmaparameter sind: $T = 10^5$ K und $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Die Ladungszahl der Ionen beträgt 2.

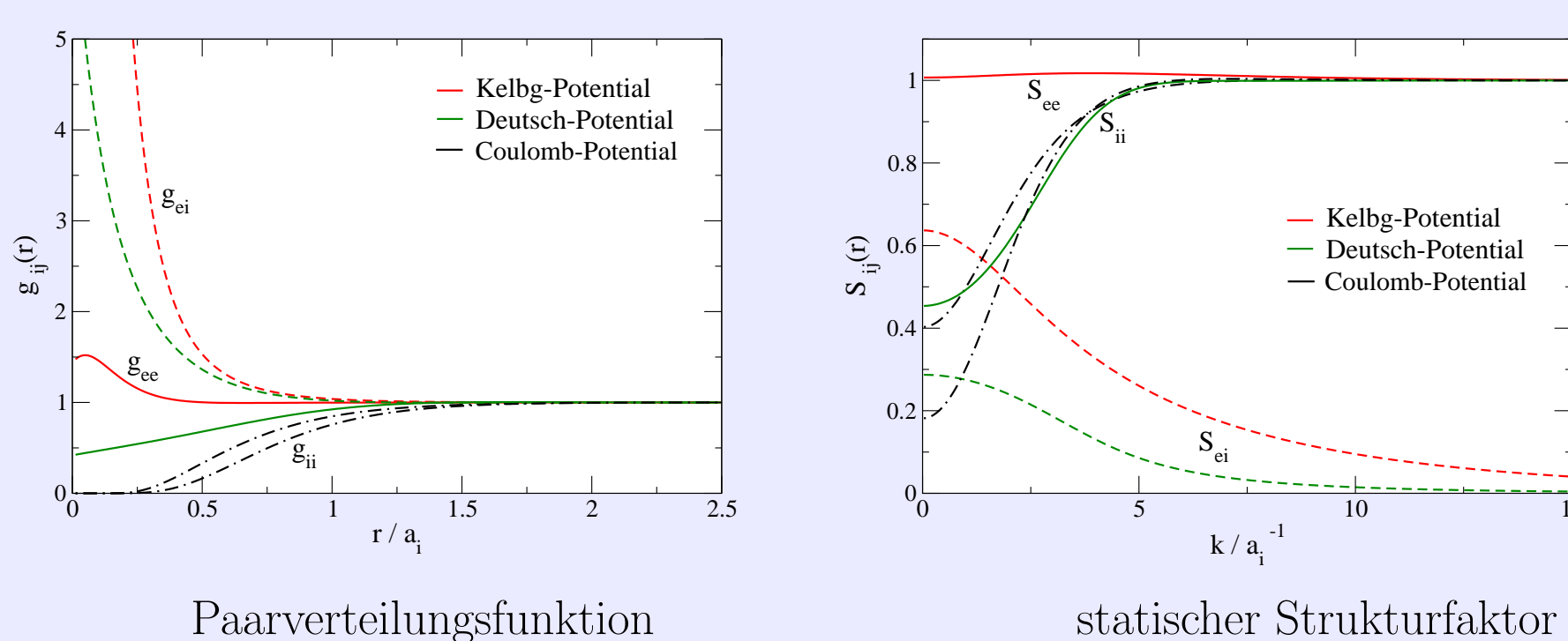
Resultate für ein 1-komponentiges Plasma (OCP)

Nachfolgend wird die Paarverteilungsfunktion sowie der Strukturfaktor für verschieden stark gekoppelte Systeme in HNC-Näherung für ein OCP dargestellt.



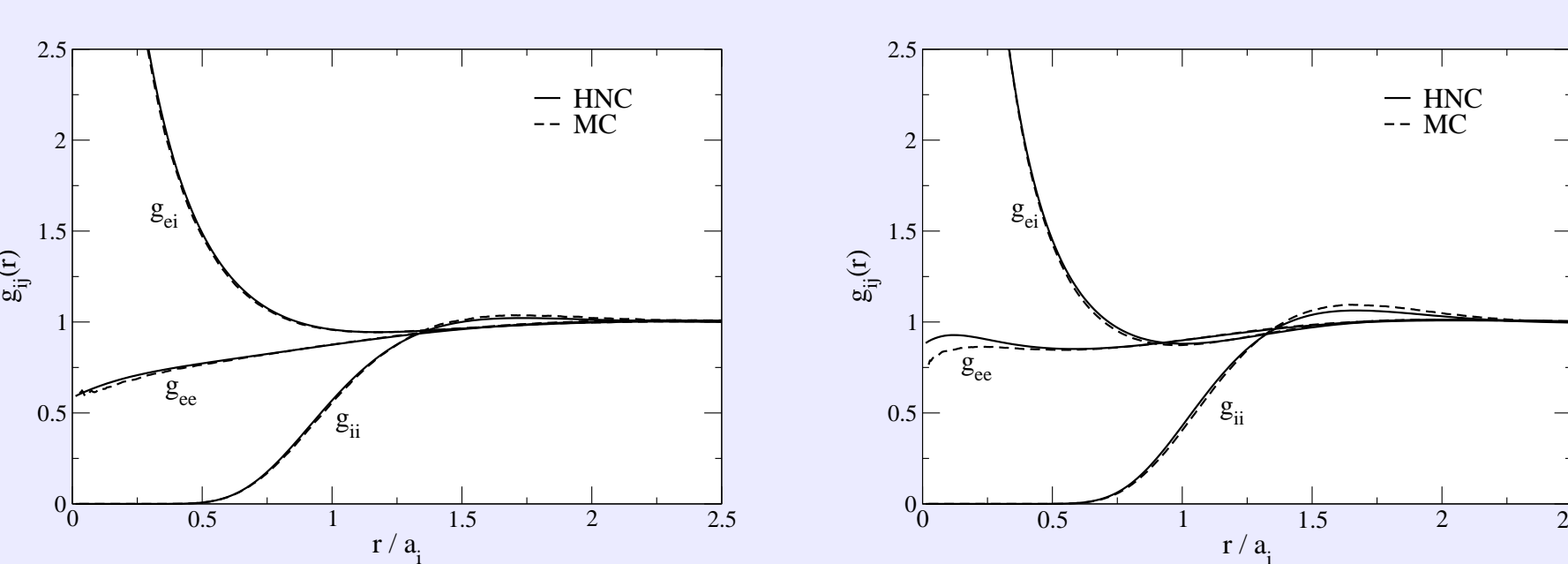
Ab $\Gamma \geq 1$ setzt die Strukturbildung ein, die die Nahordnung in einem Plasma darstellt.

Resultate für ein 2-komponentiges Plasma (TCP)



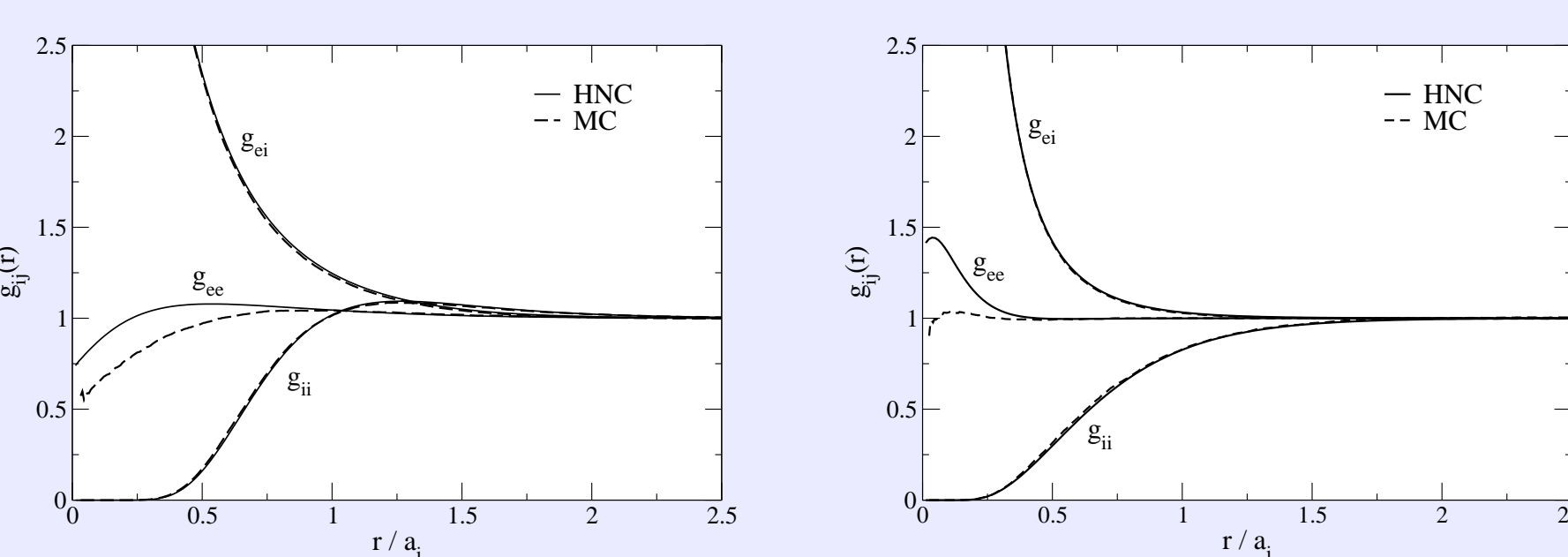
Plasmaparameter: $T = 4.0 \cdot 10^5$ K, $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und $Z = 2.5$

Vergleich mit Monte-Carlo Simulationen



Paarverteilungsfunktion für ein Elektron-Ion-Plasma mit dem Deutsch-Potential als Wechselwirkungspotential.

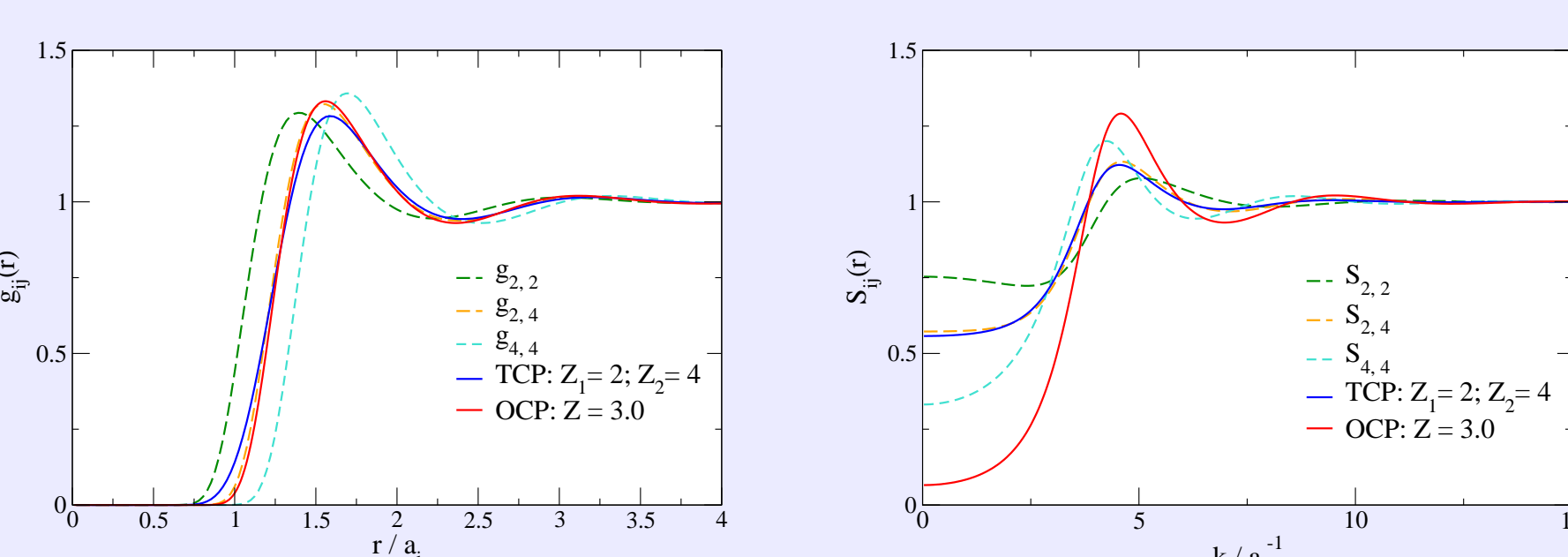
Die Plasmaparameter betragen im linken Bild: $T = 1.39 \cdot 10^5$ K, $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und $Z = 2.5$ und im rechten Bild: $T = 2.0 \cdot 10^5$ K, $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und $Z = 4$. Im Vergleich sind MC-Daten zu sehen.



Paarverteilungsfunktion für ein Elektron-Ion-Plasma mit dem Kelbg-Potential als Wechselwirkungspotential.

Die Plasmaparameter betragen im linken Bild: $T = 4.0 \cdot 10^4$ K, $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und $Z = 1$ und im rechten Bild: $T = 6.0 \cdot 10^5$ K, $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und $Z = 3$. Im Vergleich sind MC-Daten zu sehen.

Vergleich 2-Ionensorten - gemittelte Ladungszahl



Paarverteilungsfunktion und statischer Strukturfaktor für ein Ionensystem bei einer Temperatur von $T = 1.0 \cdot 10^4$ K und bei einer Ionendichte von $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Die Ladungszahlen der Ionen betragen $Z_1 = 2$ und $Z_2 = 4$. Als Wechselwirkungspotential dient das Debye-Potential mit $\kappa = 2.88 a_i^{-1}$.

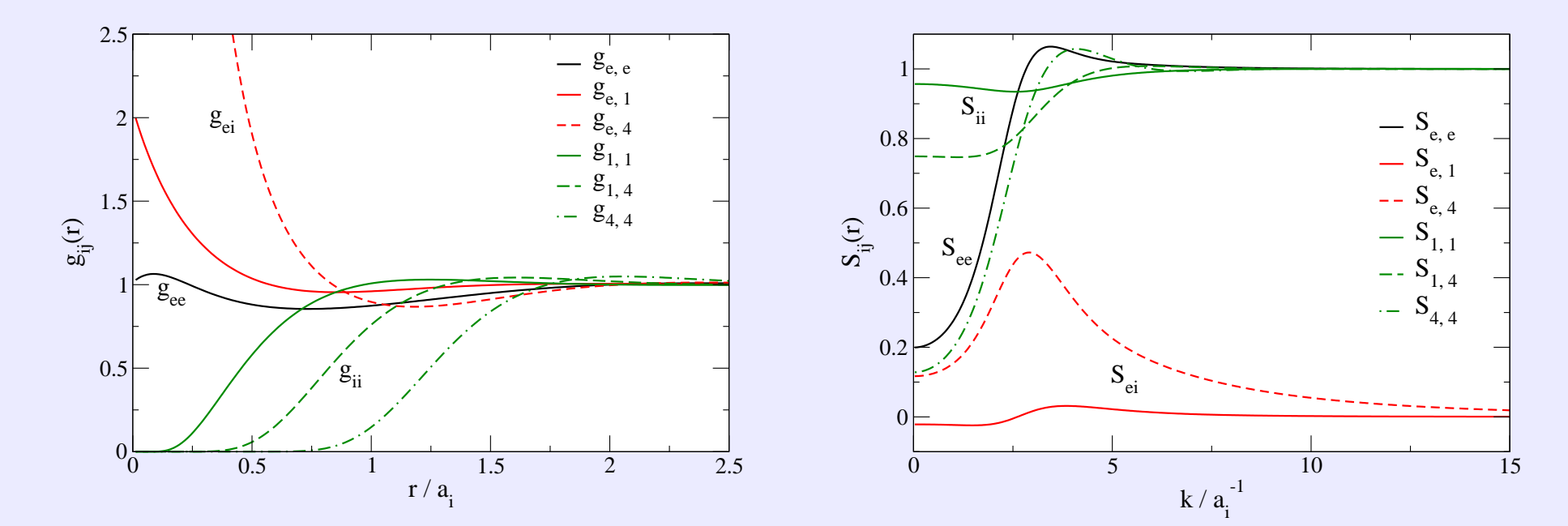
Es ist zusätzlich ein Vergleich der gemittelten Paarverteilungsfunktion bzw. des gemittelten Strukturfaktors aus dem 2-komponentigen System und dem 1-komponentigen System mit einer mittleren Ladungszahl $\bar{Z} = 3$ dargestellt.

Literatur

- [1] J.P. Hansen und I.R. McDonald, *Theory of simple liquids*, (Academic Press, 1990)
- [2] D. Kremp, M. Schlages und W.-D. Kraeft, *Quantum Statistics of Nonideal Plasmas*, (Springer, 2005)
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley, 1987)
- [4] C. Deutsch, Phys. Lett. **60A**, 317 (1977)
- [5] G. Kelbg, Ann. Phys. **12**, 219 (1963)
- [6] J. Chihara, J.Phys.F:Met. Phys. **17**, 295 (1987). J. Phys.: Condens. Matter **12**, 231 (2000)
- [7] V. Schwarz *et al.*, accepted for Contrib. Plasma Physics
- [8] G. Gregori *et al.*, Phys. Rev. E **67**, 026412 (2003)
- [9] S.H. Glenzer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 0652002 (2007)

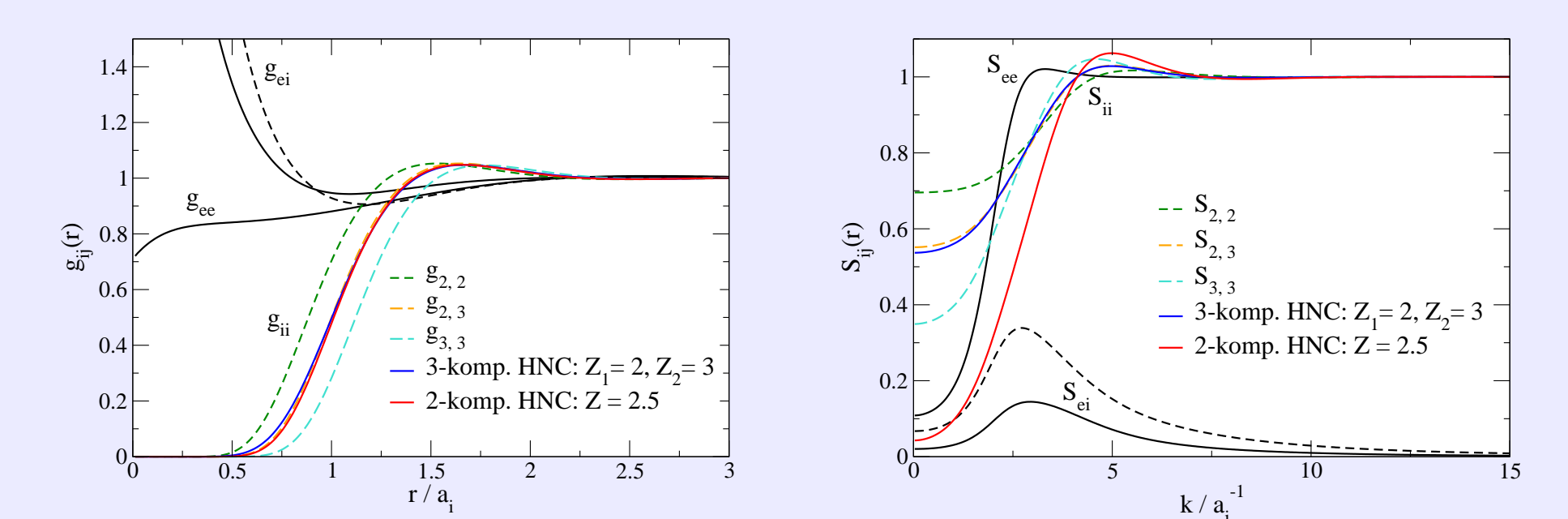
Resultate für ein 3-komponentiges Plasma

Plasma mit 2 Ionensorten



Paarverteilungsfunktion und statischer Strukturfaktor für ein CH-Plasma mit den Ladungszahlen $Z_1 = 1$ und $Z_2 = 4$ bei einer Temperatur von $T = 1.1 \cdot 10^5$ K und einer Ionendichte von $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Für die Ionenwechselwirkung wird das Coulomb-Potential verwendet, für die Elektronen- bzw. Elektron-Ionen-Wechselwirkung das Deutsch-Potential.

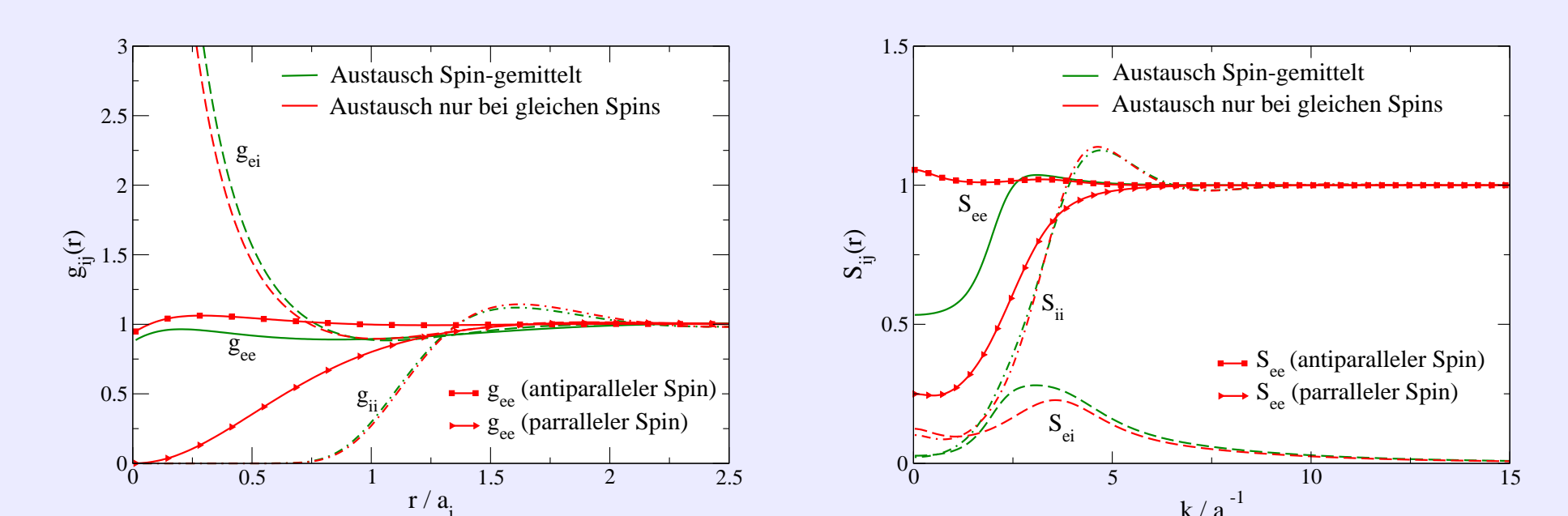
Vergleich 2-Ionensorten - gemittelte Ladungszahl



Paarverteilungsfunktion und statischer Strukturfaktor für ein 3-komponentiges Plasma mit den Ladungszahlen $Z_1 = 2$ und $Z_2 = 3$ bei einer Temperatur von $T = 1.0 \cdot 10^5$ K und einer Ionendichte von $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Für die Ionenwechselwirkung wird das Coulomb-Potential verwendet, für die Elektronen- bzw. Elektron-Ionen-Wechselwirkung das Deutsch-Potential.

Es ist zusätzlich ein Vergleich der gemittelten Paarverteilungsfunktion bzw. des gemittelten Strukturfaktors aus dem 3-komponentigen System und dem 2-komponentigen System mit einer mittleren Ladungszahl $\bar{Z} = 3$ dargestellt.

Vergleich der verwendeten Austauschsterme



Paarverteilungsfunktion und statischer Strukturfaktor für ein 3-komponentiges Plasma mit zwei Elektronenkomponenten und einer Ionenkomponente mit der Ladungszahlen $Z_1 = 3$. Als Plasmaparameter wurde eine Temperatur von $T = 8.0 \cdot 10^4$ K und eine Ionendichte von $n_i = 1.21 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Das Deutsch-Potential dient als Wechselwirkung für die Elektronen- bzw. Elektronen-Ionenkomponente. Die grüne Linie stellt das Potential aus Gleichung (8) dar. Im zweiten Fall (rote Linie) wurde anstelle des Spin-gemittelten Austausches der Austauschsterme nur für gleiche Spins (10) verwendet.

Thomson-Streuung

- differentieller Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \sigma_T \frac{k_1}{k_0} S_{ee}^{tot}(k, \omega) \quad (11)$$

mit dem Thomson-Wirkungsquerschnitt σ_T

- dynamischer Strukturfaktor der gebundenen und freien Elektronen [6]

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = |f_I(k) + q(k)|^2 S_{ii}(k, \omega) + Z_f S_{ee}^0(k, \omega) + Z_c \int \tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega') S_s(k, \omega) d\omega'$$

Aufspaltung in 3 Anteile:

1. Ionenbeitrag bestimmt durch S_{ii} : Elastische Streuung an den Ionen
 - Berücksichtigung gebundener Elektronen durch Atomformfaktor f_I
 - Berücksichtigung freier Elektronen durch Abschirmfunktion $q(k)$
 - statische Betrachtung: $S_{ii}(k, \omega) = S_{ii}(k) \delta(\omega)$
2. Elektronenbeitrag bestimmt durch S_{ee}^0 : elastische Streuung an freien Teilchen
 - Bestimmung mit Hilfe des Dissipations-Fluktuations-Theorem [8]:

$$S_{ee}^0(k, \omega) = -\frac{\hbar}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T_c)} \frac{\varepsilon_0 k^2}{\pi e^2 n_e} \text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right)$$

- schwach gekoppelter Fall: Random-Phase Approximation

3. Inelastische Streuung an stark gebundenen Elektronen bestimmt durch \tilde{S}_{ce}

- wichtige Diagnostikmethode im Bereich dichter Plasmen [9]

Numerik

- gewöhnliches Iterationsverfahren zur Lösung der Integralgleichung

$$f_{n+1} = A f_n \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, \dots, f_0 \quad \text{Startnäherung gegeben,}$$

mit einem beliebigen nichtlinearen Operator A

- verbessertes Iterationsverfahren gegeben durch

$$f_{n+1} = \alpha A f_n + (1 - \alpha) f_n \quad \text{mit} \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

- Implementierung einer Temperaturrelaxation für die Elektron-Ion-Komponente